```
data_lach29

_publ_section_comment
;
A large quantity of disordered solvent and benzylamine is present in
the structure,
a lot of this has been located. Squeeze was carried out on the
structure, to make allowance for disordered
solvent molecules.
A H+ ion must be present in the structure to balance the charge, this
is most likely coordinating between the P=O
groups at the top of the anion, however it can not be seen due to the
quality of the data.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)4(C6H5CH2NH3)7Mg[SiW10O36
(HOOCCH2CH2PO)]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C119 H217 Mg N11 O78 P2 Si2 W20'
_chemical_formula_weight          6869.47

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.0817   0.0704
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Mg'  'Mg'   0.0486   0.0363
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'C 2/c'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y, -z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x, -y, z-1/2'
 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 'x+1/2, -y+1/2, z-1/2'
```

```
_cell_length_a                    45.683(5)
_cell_length_b                    28.520(3)
_cell_length_c                    31.448(3)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  108.9000(10)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      38764(7)
_cell_formula_units_Z             8
_cell_measurement_temperature     150(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       3.8
_cell_measurement_theta_max       24.4

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.1
_exptl_crystal_size_mid           0.1
_exptl_crystal_size_min           0.05
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.354
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              25456
_exptl_absorpt_coefficient_mu     11.926
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       150(2)
_diffrn_radiation_wavelength      0.79720
_diffrn_radiation_type            'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source          'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Station 16.2'
_diffrn_measurement_method        'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             94591
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0648
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0645
_diffrn_reflns_limit_h_min        -47
_diffrn_reflns_limit_h_max        47
_diffrn_reflns_limit_k_min        -29
_diffrn_reflns_limit_k_max        29
_diffrn_reflns_limit_l_min        -32
_diffrn_reflns_limit_l_max        32
_diffrn_reflns_theta_min          3.76
_diffrn_reflns_theta_max          24.39
_reflns_number_total              22413
_reflns_number_gt                 14032
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics     'Ortep-3 for Windows'
```

```
_computing_publication_material   'WinGX'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0849P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          22413
_refine_ls_number_parameters      1408
_refine_ls_number_restraints      720
_refine_ls_R_factor_all           0.0928
_refine_ls_R_factor_gt            0.0556
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1549
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1389
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.047
_refine_ls_restrained_S_all       1.042
_refine_ls_shift/su_max           0.208
_refine_ls_shift/su_mean          0.020

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.1657(6) 0.4090(9) 0.8339(8) 0.094(8) Uiso 1 1 d U . .
H1A H 0.1429 0.4074 0.8236 0.112 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.1731 0.4005 0.8662 0.112 Uiso 1 1 calc R . .
C1S C 0.2938(11) 0.1676(17) 0.0297(15) 0.18(2) Uiso 0.86(6) 1 d PDU .
.
C2 C 0.1749(10) 0.4594(13) 0.8298(14) 0.180(16) Uiso 1 1 d DU . .
H2A H 0.1723 0.4639 0.7976 0.216 Uiso 1 1 calc R . .
H2B H 0.1974 0.4608 0.8459 0.216 Uiso 1 1 calc R . .
C2S C 0.2735(11) 0.1410(16) 0.0451(15) 0.17(2) Uiso 0.86(6) 1 d PDU .
```

.
C3 C 0.1602(11) 0.5075(15) 0.8455(14) 0.175(16) Uiso 1 1 d DU . .
C4 C 0.2864(5) 0.1579(7) 0.6774(6) 0.055(5) Uiso 1 1 d U . .
H4A H 0.2713 0.1383 0.6860 0.066 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.2746 0.1827 0.6570 0.066 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.3013(7) 0.1279(10) 0.6515(10) 0.109(9) Uiso 1 1 d DU . .
H5A H 0.3105 0.0999 0.6694 0.130 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.3180 0.1456 0.6450 0.130 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.2759(16) 0.112(3) 0.6056(19) 0.33(3) Uiso 1 1 d DU . .
C7 C 0.0963(18) 0.522(3) 0.756(3) 0.418 Uiso 1 1 d DU . .
H7A H 0.0885 0.5333 0.7246 0.502 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.1128 0.4986 0.7602 0.502 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.0539(17) 0.5314(16) 0.799(3) 0.411 Uiso 1 1 d GU . .
H8 H 0.0492 0.5636 0.7919 0.493 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.0698(17) 0.506(4) 0.775(2) 0.497 Uiso 1 1 d GDU . .
C10 C 0.0766(13) 0.459(4) 0.785(3) 0.504 Uiso 1 1 d GU . .
H10 H 0.0874 0.4419 0.7690 0.604 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.0675(18) 0.4373(16) 0.818(3) 0.421 Uiso 1 1 d GU . .
H11 H 0.0722 0.4051 0.8249 0.505 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.0516(17) 0.463(4) 0.842(2) 0.492 Uiso 1 1 d GU . .
H12 H 0.0454 0.4476 0.8643 0.590 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.0448(13) 0.510(3) 0.832(3) 0.381 Uiso 1 1 d GU . .
H13 H 0.0339 0.5268 0.8478 0.458 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.187(2) 0.120(3) 0.569(2) 0.536 Uiso 1 1 d DU . .
H14A H 0.1972 0.1488 0.5851 0.643 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.1655 0.1206 0.5690 0.643 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.2060(11) 0.101(2) 0.499(3) 0.427 Uiso 1 1 d GU . .
H15 H 0.2266 0.0942 0.5173 0.512 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.186(2) 0.125(2) 0.5178(16) 0.450 Uiso 1 1 d GDU . .
C17 C 0.156(2) 0.1351(17) 0.491(4) 0.477 Uiso 1 1 d GU . .
H17 H 0.1429 0.1513 0.5041 0.573 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.1457(10) 0.122(2) 0.447(3) 0.402 Uiso 1 1 d GU . .
H18 H 0.1250 0.1287 0.4285 0.483 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.165(2) 0.098(2) 0.4280(14) 0.388 Uiso 1 1 d GU . .
H19 H 0.1580 0.0889 0.3973 0.466 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.1954(17) 0.0878(14) 0.454(3) 0.299 Uiso 1 1 d GU . .
H20 H 0.2088 0.0716 0.4417 0.359 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.5378(6) 0.3274(10) 1.0143(9) 0.106(9) Uiso 1 1 d U . .
H21A H 0.5424 0.3453 1.0427 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.5544 0.3039 1.0182 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.5378(7) 0.3595(12) 0.9782(12) 0.148(13) Uiso 1 1 d DU . .
H22A H 0.5237 0.3861 0.9770 0.178 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.5309 0.3430 0.9489 0.178 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.5726(7) 0.3777(12) 0.9892(12) 0.149(13) Uiso 1 1 d DU . .
H23A H 0.5857 0.3513 0.9858 0.178 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.5804 0.3882 1.0209 0.178 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.5757(12) 0.4199(16) 0.9574(16) 0.26(2) Uiso 1 1 d DU . .
H24A H 0.5975 0.4282 0.9643 0.394 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.5642 0.4472 0.9627 0.394 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.5671 0.4103 0.9259 0.394 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.4787(7) 0.3329(10) 0.9951(9) 0.105(9) Uiso 1 1 d U . .
H25A H 0.4599 0.3131 0.9880 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.4770 0.3523 0.9683 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.4802(8) 0.3647(12) 1.0346(12) 0.154(13) Uiso 1 1 d DU . .
H26A H 0.4949 0.3908 1.0365 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.4871 0.3469 1.0631 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.4457(9) 0.3846(14) 1.0253(14) 0.185(16) Uiso 1 1 d DU . .
H27A H 0.4375 0.3967 0.9942 0.222 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.4320 0.3589 1.0287 0.222 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.4460(13) 0.4212(19) 1.0563(17) 0.30(3) Uiso 1 1 d DU . .
H28A H 0.4250 0.4332 1.0504 0.446 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.4595 0.4467 1.0527 0.446 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.4539 0.4090 1.0871 0.446 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.5112(6) 0.2714(10) 1.0455(9) 0.103(9) Uiso 1 1 d DU . .
H29A H 0.5309 0.2542 1.0517 0.123 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.5130 0.2917 1.0718 0.123 Uiso 1 1 calc R . .

C30 C 0.4864(9) 0.2371(13) 1.0416(13) 0.176(16) Uiso 1 1 d DU . .
H30A H 0.4666 0.2537 1.0270 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.4883 0.2130 1.0200 0.211 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.4827(8) 0.2119(12) 1.0800(11) 0.143(12) Uiso 1 1 d DU . .
H31A H 0.4847 0.2354 1.1040 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.5006 0.1905 1.0911 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.4547(13) 0.1839(19) 1.0763(18) 0.27(3) Uiso 1 1 d U . .
H32A H 0.4571 0.1688 1.1052 0.403 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.4521 0.1599 1.0531 0.403 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.4366 0.2045 1.0682 0.403 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.5011(7) 0.2725(11) 0.9624(10) 0.116(10) Uiso 1 1 d U . .
H33A H 0.4796 0.2606 0.9531 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.5029 0.2932 0.9381 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.5218(11) 0.2329(16) 0.9666(15) 0.203(18) Uiso 1 1 d DU . .
H34A H 0.5148 0.2085 0.9835 0.244 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.5424 0.2434 0.9864 0.244 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.5274(12) 0.2083(18) 0.9274(18) 0.24(2) Uiso 1 1 d U . .
H35A H 0.5387 0.1784 0.9367 0.288 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.5077 0.2022 0.9029 0.288 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.5468(13) 0.244(2) 0.9138(18) 0.29(3) Uiso 1 1 d DU . .
H36A H 0.5508 0.2332 0.8866 0.440 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.5665 0.2478 0.9381 0.440 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H 0.5358 0.2739 0.9078 0.440 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.402(2) 0.038(3) 1.041(3) 0.43(5) Uiso 1 1 d U . .
H37A H 0.4082 0.0215 1.0702 0.516 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.4202 0.0487 1.0345 0.516 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.384(2) 0.076(3) 1.043(3) 0.44(6) Uiso 1 1 d DU . .
H38A H 0.3620 0.0649 1.0320 0.524 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.3860 0.0986 1.0208 0.524 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.3864(15) 0.106(2) 1.087(2) 0.30(3) Uiso 1 1 d DU . .
H39A H 0.3712 0.0924 1.1001 0.359 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.4071 0.0992 1.1087 0.359 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.3823(12) 0.1607(19) 1.0890(17) 0.26(2) Uiso 1 1 d DU . .
H40A H 0.3894 0.1711 1.1204 0.385 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.3605 0.1688 1.0751 0.385 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.3946 0.1762 1.0727 0.385 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.3452(14) 0.004(3) 0.970(2) 0.47(6) Uiso 1 1 d DU . .
H41A H 0.3397 0.0360 0.9578 0.565 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.3397 -0.0189 0.9449 0.565 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.3303(12) -0.0079(16) 1.0047(17) 0.23(2) Uiso 1 1 d DU . .
H42A H 0.3451 -0.0040 1.0354 0.271 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.3226 -0.0406 1.0010 0.271 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.3027(14) 0.028(2) 0.995(2) 0.34(4) Uiso 1 1 d DU . .
H43A H 0.3085 0.0562 1.0150 0.409 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.2951 0.0383 0.9635 0.409 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.2798(15) -0.0010(19) 1.007(2) 0.31(3) Uiso 1 1 d DU . .
H44A H 0.2604 0.0163 1.0008 0.460 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.2878 -0.0092 1.0389 0.460 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 0.2762 -0.0298 0.9889 0.460 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.3860(12) -0.0527(19) 1.016(2) 0.33(3) Uiso 1 1 d DU . .
H45A H 0.3805 -0.0578 1.0439 0.393 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 0.3749 -0.0755 0.9929 0.393 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.4210(12) -0.0539(19) 1.025(3) 0.404 Uiso 1 1 d DU . .
H46A H 0.4319 -0.0317 1.0494 0.484 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.4262 -0.0467 0.9979 0.484 Uiso 1 1 calc R . .
C47 C 0.4294(13) -0.1089(18) 1.041(2) 0.317 Uiso 1 1 d DU . .
H47A H 0.4282 -0.1151 1.0717 0.381 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.4164 -0.1317 1.0196 0.381 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.4644(13) -0.108(2) 1.041(3) 0.408 Uiso 1 1 d DU . .
H48A H 0.4745 -0.1378 1.0518 0.612 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.4757 -0.0823 1.0601 0.612 Uiso 1 1 calc R . .
H48C H 0.4644 -0.1026 1.0099 0.612 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.3961(11) 0.0131(15) 0.9611(14) 0.197(18) Uiso 1 1 d DU . .
H49A H 0.3968 0.0477 0.9597 0.236 Uiso 1 1 calc R . .
H49B H 0.4178 0.0022 0.9728 0.236 Uiso 1 1 calc R . .
C50 C 0.3832(12) -0.0043(18) 0.9128(17) 0.29(3) Uiso 1 1 d DU . .

H50A H 0.3840 -0.0390 0.9120 0.353 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.3614 0.0056 0.8993 0.353 Uiso 1 1 calc R . .
C51 C 0.4020(11) 0.0157(15) 0.8874(13) 0.205(19) Uiso 1 1 d DU . .
H51A H 0.3915 0.0087 0.8552 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
H51B H 0.4017 0.0502 0.8907 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
C52 C 0.4343(12) 0.001(2) 0.898(2) 0.33(4) Uiso 1 1 d DU . .
H52A H 0.4437 0.0185 0.8789 0.490 Uiso 1 1 calc R . .
H52B H 0.4353 -0.0323 0.8931 0.490 Uiso 1 1 calc R . .
H52C H 0.4455 0.0087 0.9298 0.490 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C 0.0703(9) 0.0571(13) 0.7066(13) 0.171(15) Uiso 1 1 d DU . .
H53A H 0.0840 0.0841 0.7187 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H 0.0655 0.0564 0.6736 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.0410(10) 0.0616(15) 0.7182(14) 0.215(19) Uiso 1 1 d DU . .
H54A H 0.0468 0.0616 0.7514 0.258 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.0285 0.0330 0.7073 0.258 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 0.0196(11) 0.1046(18) 0.7004(16) 0.28(3) Uiso 1 1 d DU . .
H55A H -0.0004 0.0994 0.7056 0.332 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 0.0293 0.1328 0.7176 0.332 Uiso 1 1 calc R . .
C56 C 0.0143(10) 0.1124(14) 0.6556(14) 0.205(19) Uiso 1 1 d DU . .
H56A H 0.0020 0.1411 0.6465 0.308 Uiso 1 1 calc R . .
H56B H 0.0030 0.0858 0.6383 0.308 Uiso 1 1 calc R . .
H56C H 0.0341 0.1161 0.6501 0.308 Uiso 1 1 calc R . .
C57 C 0.0642(12) -0.0307(17) 0.7199(17) 0.26(2) Uiso 1 1 d DU . .
H57A H 0.0778 -0.0577 0.7332 0.309 Uiso 1 1 calc R . .
H57B H 0.0518 -0.0249 0.7400 0.309 Uiso 1 1 calc R . .
C58 C 0.0433(14) -0.048(2) 0.681(2) 0.32(3) Uiso 1 1 d DU . .
H58A H 0.0550 -0.0655 0.6643 0.389 Uiso 1 1 calc R . .
H58B H 0.0333 -0.0211 0.6617 0.389 Uiso 1 1 calc R . .
C59 C 0.0165(13) -0.082(2) 0.6864(17) 0.28(3) Uiso 1 1 d DU . .
H59A H 0.0249 -0.1057 0.7101 0.333 Uiso 1 1 calc R . .
H59B H -0.0001 -0.0640 0.6928 0.333 Uiso 1 1 calc R . .
C60 C 0.0057(11) -0.1036(16) 0.6397(15) 0.23(2) Uiso 1 1 d DU . .
H60A H -0.0096 -0.1281 0.6385 0.349 Uiso 1 1 calc R . .
H60B H 0.0234 -0.1175 0.6332 0.349 Uiso 1 1 calc R . .
H60C H -0.0037 -0.0794 0.6174 0.349 Uiso 1 1 calc R . .
C61 C 0.1014(12) 0.006(2) 0.6916(16) 0.336 Uiso 1 1 d DU . .
H61A H 0.0952 0.0307 0.6688 0.404 Uiso 1 1 calc R . .
H61B H 0.0966 -0.0253 0.6766 0.404 Uiso 1 1 calc R . .
C62 C 0.1354(10) 0.0093(16) 0.7195(16) 0.22(2) Uiso 1 1 d DU . .
H62A H 0.1369 -0.0132 0.7441 0.266 Uiso 1 1 calc R . .
H62B H 0.1363 0.0405 0.7335 0.266 Uiso 1 1 calc R . .
C63 C 0.1685(9) 0.0055(13) 0.7145(14) 0.170(16) Uiso 1 1 d DU . .
H63A H 0.1814 0.0326 0.7289 0.204 Uiso 1 1 calc R . .
H63B H 0.1789 -0.0236 0.7288 0.204 Uiso 1 1 calc R . .
C64 C 0.1635(10) 0.0049(13) 0.6661(14) 0.191(18) Uiso 1 1 d DU . .
H64A H 0.1823 -0.0062 0.6607 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
H64B H 0.1586 0.0367 0.6540 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
H64C H 0.1462 -0.0161 0.6513 0.287 Uiso 1 1 calc R . .
C65 C 0.0973(11) 0.0145(16) 0.7812(15) 0.22(2) Uiso 1 1 d DU . .
H65A H 0.1014 0.0484 0.7868 0.263 Uiso 1 1 calc R . .
H65B H 0.0779 0.0087 0.7880 0.263 Uiso 1 1 calc R . .
C66 C 0.1217(17) -0.008(3) 0.821(2) 0.49(7) Uiso 1 1 d DU . .
H66A H 0.1212 -0.0425 0.8174 0.584 Uiso 1 1 calc R . .
H66B H 0.1425 0.0032 0.8226 0.584 Uiso 1 1 calc R . .
C67 C 0.1160(15) 0.004(2) 0.8651(19) 0.29(3) Uiso 1 1 d DU . .
H67A H 0.1262 0.0338 0.8778 0.351 Uiso 1 1 calc R . .
H67B H 0.1236 -0.0213 0.8877 0.351 Uiso 1 1 calc R . .
C68 C 0.0792(17) 0.008(3) 0.850(3) 0.58(9) Uiso 1 1 d DU . .
H68A H 0.0729 0.0175 0.8755 0.868 Uiso 1 1 calc R . .
H68B H 0.0698 -0.0220 0.8382 0.868 Uiso 1 1 calc R . .
H68C H 0.0723 0.0320 0.8260 0.868 Uiso 1 1 calc R . .
C69 C 0.5166(12) 0.2392(17) 0.7954(12) 0.26(3) Uiso 1 1 d DU . .
H69A H 0.5304 0.2163 0.8159 0.315 Uiso 1 1 calc R . .
H69B H 0.5035 0.2561 0.8100 0.315 Uiso 1 1 calc R . .
C70 C 0.5327(8) 0.2714(12) 0.7690(11) 0.142(12) Uiso 1 1 d DU . .
H70A H 0.5498 0.2554 0.7619 0.170 Uiso 1 1 calc R . .

H70B H 0.5179 0.2850 0.7414 0.170 Uiso 1 1 calc R . .
C71 C 0.5433(10) 0.3046(15) 0.8047(14) 0.213(19) Uiso 1 1 d DU . .
H71A H 0.5459 0.2862 0.8324 0.255 Uiso 1 1 calc R . .
H71B H 0.5254 0.3255 0.8013 0.255 Uiso 1 1 calc R . .
C72 C 0.5707(9) 0.3365(13) 0.8161(13) 0.193(17) Uiso 1 1 d DU . .
H72A H 0.5724 0.3534 0.8439 0.289 Uiso 1 1 calc R . .
H72B H 0.5681 0.3590 0.7916 0.289 Uiso 1 1 calc R . .
H72C H 0.5895 0.3180 0.8202 0.289 Uiso 1 1 calc R . .
C73 C 0.4807(9) 0.1881(14) 0.7686(14) 0.198(18) Uiso 1 1 d DU . .
H73A H 0.4686 0.2098 0.7810 0.237 Uiso 1 1 calc R . .
H73B H 0.4656 0.1749 0.7411 0.237 Uiso 1 1 calc R . .
C74 C 0.4861(8) 0.1532(12) 0.7964(12) 0.156(14) Uiso 1 1 d DU . .
H74A H 0.5063 0.1612 0.8191 0.188 Uiso 1 1 calc R . .
H74B H 0.4906 0.1268 0.7789 0.188 Uiso 1 1 calc R . .
C75 C 0.4690(10) 0.1312(14) 0.8228(14) 0.201(18) Uiso 1 1 d DU . .
H75A H 0.4738 0.1492 0.8511 0.241 Uiso 1 1 calc R . .
H75B H 0.4468 0.1366 0.8063 0.241 Uiso 1 1 calc R . .
C76 C 0.4720(13) 0.0823(16) 0.8352(18) 0.29(3) Uiso 1 1 d DU . .
H76A H 0.4575 0.0747 0.8512 0.437 Uiso 1 1 calc R . .
H76B H 0.4932 0.0762 0.8548 0.437 Uiso 1 1 calc R . .
H76C H 0.4675 0.0630 0.8081 0.437 Uiso 1 1 calc R . .
C77 C 0.0213(8) 0.3208(11) 0.7339(11) 0.141(12) Uiso 1 1 d DU . .
H77A H 0.0366 0.3345 0.7610 0.169 Uiso 1 1 calc R . .
H77B H 0.0328 0.2983 0.7213 0.169 Uiso 1 1 calc R . .
C78 C 0.0117(7) 0.3578(11) 0.7021(10) 0.122(11) Uiso 1 1 d DU . .
H78A H 0.0009 0.3816 0.7145 0.146 Uiso 1 1 calc R . .
H78B H -0.0037 0.3449 0.6746 0.146 Uiso 1 1 calc R . .
C79 C 0.0362(9) 0.3823(14) 0.6885(13) 0.167(15) Uiso 1 1 d U . .
H79A H 0.0524 0.3921 0.7166 0.201 Uiso 1 1 calc R . .
H79B H 0.0457 0.3585 0.6742 0.201 Uiso 1 1 calc R . .
C80 C 0.0290(11) 0.4233(16) 0.6586(15) 0.22(2) Uiso 1 1 d U . .
H80A H 0.0480 0.4344 0.6537 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
H80B H 0.0205 0.4483 0.6725 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
H80C H 0.0138 0.4145 0.6298 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
C81 C -0.0168(9) 0.2652(13) 0.7102(12) 0.158(14) Uiso 1 1 d U . .
H81A H -0.0293 0.2872 0.6871 0.189 Uiso 1 1 calc R . .
H81B H -0.0013 0.2510 0.6982 0.189 Uiso 1 1 calc R . .
C82 C -0.0368(7) 0.2284(10) 0.7154(9) 0.107(9) Uiso 1 1 d U . .
H82A H -0.0505 0.2416 0.7311 0.128 Uiso 1 1 calc R . .
H82B H -0.0238 0.2041 0.7352 0.128 Uiso 1 1 calc R . .
C83 C -0.0564(8) 0.2052(12) 0.6735(11) 0.136(12) Uiso 1 1 d U . .
H83A H -0.0705 0.2295 0.6554 0.163 Uiso 1 1 calc R . .
H83B H -0.0425 0.1958 0.6565 0.163 Uiso 1 1 calc R . .
C84 C -0.0749(9) 0.1657(14) 0.6748(13) 0.182(16) Uiso 1 1 d U . .
H84A H -0.0858 0.1552 0.6441 0.273 Uiso 1 1 calc R . .
H84B H -0.0899 0.1742 0.6897 0.273 Uiso 1 1 calc R . .
H84C H -0.0616 0.1403 0.6916 0.273 Uiso 1 1 calc R . .
C85 C 0.2362(7) 0.4169(10) 0.7088(9) 0.109(9) Uiso 1 1 d U . .
H85A H 0.2591 0.4165 0.7184 0.131 Uiso 1 1 calc R . .
H85B H 0.2285 0.4179 0.6755 0.131 Uiso 1 1 calc R . .
C86 C 0.2261(5) 0.4598(8) 0.7262(7) 0.064(6) Uiso 1 1 d U . .
C87 C 0.2434(7) 0.4811(10) 0.7654(10) 0.111(10) Uiso 1 1 d U . .
H87 H 0.2634 0.4693 0.7814 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
C88 C 0.2317(7) 0.5207(11) 0.7826(11) 0.116(10) Uiso 1 1 d U . .
H88 H 0.2432 0.5368 0.8092 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
C89 C 0.2024(7) 0.5333(10) 0.7570(10) 0.106(9) Uiso 1 1 d U . .
H89 H 0.1936 0.5588 0.7682 0.127 Uiso 1 1 calc R . .
C90 C 0.1858(8) 0.5160(11) 0.7213(11) 0.123(11) Uiso 1 1 d U . .
H90 H 0.1658 0.5285 0.7066 0.148 Uiso 1 1 calc R . .
C91 C 0.1966(6) 0.4780(9) 0.7029(9) 0.090(8) Uiso 1 1 d U . .
H91 H 0.1843 0.4647 0.6751 0.108 Uiso 1 1 calc R . .
C92 C 0.3067(5) 0.3264(8) 0.6566(7) 0.074(7) Uiso 1 1 d U . .
H92A H 0.2989 0.3059 0.6299 0.089 Uiso 1 1 calc R . .
H92B H 0.3291 0.3309 0.6625 0.089 Uiso 1 1 calc R . .
C93 C 0.2908(6) 0.3738(8) 0.6454(8) 0.076(7) Uiso 1 1 d U . .
C94 C 0.3046(7) 0.4140(10) 0.6667(9) 0.104(9) Uiso 1 1 d U . .

H94 H 0.3239 0.4126 0.6902 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
C95 C 0.2902(8) 0.4562(12) 0.6535(11) 0.129(11) Uiso 1 1 d U . .
H95 H 0.3006 0.4841 0.6664 0.155 Uiso 1 1 calc R . .
C96 C 0.2631(7) 0.4596(11) 0.6244(9) 0.104(9) Uiso 1 1 d U . .
H96 H 0.2531 0.4892 0.6172 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
C97 C 0.2491(6) 0.4194(9) 0.6040(8) 0.087(8) Uiso 1 1 d U . .
H97 H 0.2293 0.4221 0.5816 0.105 Uiso 1 1 calc R . .
C98 C 0.2610(5) 0.3778(8) 0.6132(7) 0.071(6) Uiso 1 1 d U . .
H98 H 0.2500 0.3508 0.5988 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
C99 C 0.2731(5) 0.0934(7) 0.8230(7) 0.065(6) Uiso 1 1 d U . .
H99A H 0.2662 0.0723 0.7967 0.078 Uiso 1 1 calc R . .
H99B H 0.2924 0.0803 0.8442 0.078 Uiso 1 1 calc R . .
C100 C 0.2495(5) 0.0947(7) 0.8449(7) 0.060(6) Uiso 1 1 d U . .
C101 C 0.2578(5) 0.1004(8) 0.8914(7) 0.071(6) Uiso 1 1 d U . .
H101 H 0.2790 0.1054 0.9080 0.086 Uiso 1 1 calc R . .
C102 C 0.2370(6) 0.0994(8) 0.9146(9) 0.089(8) Uiso 1 1 d U . .
H102 H 0.2439 0.1012 0.9465 0.107 Uiso 1 1 calc R . .
C103 C 0.2066(6) 0.0957(8) 0.8913(8) 0.083(7) Uiso 1 1 d U . .
H103 H 0.1920 0.0965 0.9069 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
C104 C 0.1966(6) 0.0908(9) 0.8460(9) 0.096(8) Uiso 1 1 d U . .
H104 H 0.1751 0.0881 0.8303 0.115 Uiso 1 1 calc R . .
C105 C 0.2187(5) 0.0897(7) 0.8211(8) 0.070(6) Uiso 1 1 d U . .
H105 H 0.2119 0.0857 0.7894 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
C106 C 0.2117(6) 0.2514(9) 0.8603(8) 0.092(8) Uiso 1 1 d U . .
H10A H 0.1993 0.2789 0.8458 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.2342 0.2577 0.8716 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
C107 C 0.1949(7) 0.2136(10) 0.9003(10) 0.109(9) Uiso 1 1 d U . .
C108 C 0.2149(6) 0.2099(8) 0.9437(9) 0.089(8) Uiso 1 1 d U . .
H108 H 0.2366 0.2130 0.9491 0.107 Uiso 1 1 calc R . .
C109 C 0.2044(6) 0.2018(9) 0.9790(9) 0.089(8) Uiso 1 1 d U . .
H109 H 0.2183 0.1996 1.0089 0.107 Uiso 1 1 calc R . .
C110 C 0.1731(7) 0.1971(9) 0.9702(10) 0.107(9) Uiso 1 1 d U . .
H110 H 0.1660 0.1909 0.9949 0.128 Uiso 1 1 calc R . .
C111 C 0.1521(9) 0.2005(12) 0.9298(12) 0.147(13) Uiso 1 1 d U . .
H111 H 0.1307 0.1979 0.9258 0.176 Uiso 1 1 calc R . .
C112 C 0.1629(8) 0.2081(11) 0.8928(11) 0.128(11) Uiso 1 1 d U . .
H112 H 0.1487 0.2095 0.8631 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
C113 C 0.2700(8) 0.4257(11) 0.8969(11) 0.143(12) Uiso 1 1 d DU . .
H11C H 0.2538 0.4488 0.8969 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
H11D H 0.2771 0.4316 0.8708 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
C114 C 0.2993(9) 0.4266(13) 0.9451(13) 0.138(12) Uiso 1 1 d U . .
C115 C 0.3298(12) 0.4068(16) 0.9464(17) 0.201(19) Uiso 1 1 d U . .
H115 H 0.3317 0.3927 0.9200 0.242 Uiso 1 1 calc R . .
C116 C 0.3542(13) 0.4083(19) 0.983(2) 0.24(2) Uiso 1 1 d U . .
H116 H 0.3721 0.3911 0.9833 0.284 Uiso 1 1 calc R . .
C117 C 0.3549(13) 0.436(2) 1.0234(19) 0.25(2) Uiso 1 1 d U . .
H117 H 0.3725 0.4347 1.0498 0.295 Uiso 1 1 calc R . .
C118 C 0.3275(10) 0.4645(15) 1.0219(14) 0.164(14) Uiso 1 1 d U . .
H118 H 0.3272 0.4885 1.0427 0.196 Uiso 1 1 calc R . .
C119 C 0.3014(11) 0.4502(14) 0.9835(15) 0.181(16) Uiso 1 1 d U . .
H119 H 0.2819 0.4591 0.9858 0.218 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.2035(16) 0.077(2) 0.597(2) 0.37(3) Uiso 1 1 d DU . .
N1S N 0.3108(7) 0.1788(10) -0.0036(10) 0.123(13) Uiso 0.86(6) 1 d PDU
. .
N2 N 0.105(3) 0.563(3) 0.792(3) 0.58(5) Uiso 1 1 d DU . .
N3 N 0.5069(5) 0.3020(8) 1.0052(7) 0.092(6) Uiso 1 1 d U . .
N4 N 0.3802(13) 0.0003(19) 0.9989(19) 0.30(2) Uiso 1 1 d DU . .
N5 N 0.0862(6) 0.0113(9) 0.7274(9) 0.121(8) Uiso 1 1 d DU . .
N6 N 0.5000 0.2214(10) 0.7500 0.085(8) Uiso 1 2 d SDU . .
N7 N 0.0000 0.2928(8) 0.7500 0.061(7) Uiso 1 2 d SU . .
N8 N 0.2253(4) 0.3724(6) 0.7239(6) 0.068(5) Uiso 1 1 d U . .
N9 N 0.3022(4) 0.3024(6) 0.6955(5) 0.058(5) Uiso 1 1 d U . .
N10 N 0.2797(4) 0.1414(5) 0.8078(5) 0.055(4) Uiso 1 1 d U . .
N11 N 0.2032(8) 0.2104(12) 0.8400(11) 0.184(13) Uiso 1 1 d U . .
N12 N 0.2600(5) 0.3812(8) 0.8972(7) 0.094(6) Uiso 1 1 d DU . .
O1 O 0.1622(3) 0.3166(4) 0.8039(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .

```
O2 O 0.1030(3) 0.2955(5) 0.8059(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O3 O 0.1139(3) 0.3602(5) 0.7460(4) 0.060(3) Uani 1 1 d U . .
O4 O 0.1237(3) 0.4380(5) 0.7038(5) 0.068(3) Uani 1 1 d U . .
O5 O 0.1727(3) 0.3826(5) 0.7546(4) 0.059(3) Uani 1 1 d U . .
O6 O 0.1572(3) 0.3779(4) 0.6646(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O7 O 0.1717(3) 0.4032(5) 0.5869(4) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
O8 O 0.1926(3) 0.3202(5) 0.6320(4) 0.057(3) Uani 1 1 d U . .
O9 O 0.2405(3) 0.2774(4) 0.6932(4) 0.055(3) Uani 1 1 d U . .
O10 O 0.2326(3) 0.2577(5) 0.6064(4) 0.067(3) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.2150(2) 0.1928(4) 0.6571(4) 0.051(2) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.2111(3) 0.1141(5) 0.7074(4) 0.064(3) Uani 1 1 d U . .
O13 O 0.2308(3) 0.1967(5) 0.7485(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.1719(2) 0.1715(5) 0.7399(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.1322(3) 0.1337(5) 0.7816(4) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.1370(2) 0.2327(4) 0.7706(4) 0.047(2) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.1438(2) 0.3033(4) 0.7138(4) 0.049(2) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.1816(2) 0.2473(4) 0.6865(4) 0.048(2) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.1238(3) 0.2226(5) 0.6781(4) 0.0517(19) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.1346(3) 0.2909(5) 0.6274(4) 0.053(2) Uani 1 1 d U . .
O21 O 0.0861(3) 0.2753(5) 0.7162(4) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
O22 O 0.0976(3) 0.3596(4) 0.6547(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O23 O 0.1135(3) 0.3701(5) 0.5856(4) 0.058(3) Uani 1 1 d U . .
O24 O 0.1465(3) 0.3165(5) 0.5558(4) 0.062(2) Uani 1 1 d U . .
O25 O 0.1712(3) 0.2369(5) 0.5930(4) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
O26 O 0.1593(3) 0.1577(4) 0.6491(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O27 O 0.1195(3) 0.1312(5) 0.6902(4) 0.062(2) Uani 1 1 d U . .
O28 O 0.0871(2) 0.1887(5) 0.7189(4) 0.055(3) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.0318(3) 0.2272(6) 0.6606(5) 0.073(4) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.0717(3) 0.2763(5) 0.6259(4) 0.063(3) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.0506(3) 0.3513(6) 0.5670(5) 0.081(4) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.0908(3) 0.2875(5) 0.5517(4) 0.065(3) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.1268(3) 0.2327(5) 0.5090(4) 0.072(4) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.1143(3) 0.2037(5) 0.5845(4) 0.058(3) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.1080(3) 0.1071(5) 0.6003(5) 0.069(3) Uani 1 1 d U . .
O36 O 0.0753(3) 0.1815(5) 0.6299(4) 0.065(3) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.2145(3) 0.3564(5) 0.8227(4) 0.053(3) Uani 1 1 d U . .
O38 O 0.2200(3) 0.2862(5) 0.7696(4) 0.060(3) Uani 1 1 d U . .
O39 O 0.2709(2) 0.2427(4) 0.8299(4) 0.048(3) Uani 1 1 d U . .
O40 O 0.2809(3) 0.3203(5) 0.7750(4) 0.058(3) Uani 1 1 d U . .
O41 O 0.2804(3) 0.2594(5) 0.9179(4) 0.058(3) Uani 1 1 d U . .
O42 O 0.2978(3) 0.3251(5) 0.8670(4) 0.055(2) Uani 1 1 d U . .
O43 O 0.2999(3) 0.4022(5) 0.8164(5) 0.068(3) Uani 1 1 d U . .
O44 O 0.3378(3) 0.3494(5) 0.7798(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O45 O 0.3766(3) 0.3839(5) 0.7348(5) 0.066(3) Uani 1 1 d U . .
O46 O 0.3687(3) 0.2879(4) 0.7435(4) 0.052(3) Uani 1 1 d U . .
O47 O 0.3937(3) 0.2213(5) 0.6994(4) 0.063(3) Uani 1 1 d U . .
O48 O 0.3839(3) 0.1584(4) 0.7571(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O49 O 0.3730(3) 0.0796(5) 0.7977(5) 0.066(3) Uani 1 1 d U . .
O50 O 0.3479(2) 0.1374(4) 0.8492(4) 0.052(3) Uani 1 1 d U . .
O51 O 0.3174(2) 0.1949(5) 0.8886(4) 0.054(3) Uani 1 1 d U . .
O52 O 0.3296(2) 0.2722(4) 0.8368(4) 0.048(2) Uani 1 1 d U . .
O53 O 0.3627(2) 0.2147(4) 0.8016(4) 0.046(2) Uani 1 1 d U . .
O54 O 0.3755(2) 0.2224(4) 0.8854(4) 0.051(2) Uani 1 1 d U . .
O55 O 0.3861(2) 0.2940(4) 0.8369(4) 0.049(2) Uani 1 1 d U . .
O56 O 0.3424(3) 0.2757(5) 0.9289(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O57 O 0.3532(3) 0.3602(5) 0.8686(4) 0.057(3) Uani 1 1 d U . .
O58 O 0.3924(3) 0.3833(5) 0.8283(4) 0.057(2) Uani 1 1 d U . .
O59 O 0.4215(3) 0.3255(5) 0.7929(4) 0.059(3) Uani 1 1 d U . .
O60 O 0.4182(3) 0.2380(5) 0.7886(5) 0.062(3) Uani 1 1 d U . .
O61 O 0.4059(3) 0.1513(5) 0.8504(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O62 O 0.3949(3) 0.1381(5) 0.9237(4) 0.062(3) Uani 1 1 d U . .
O63 O 0.3666(3) 0.1956(5) 0.9610(4) 0.061(3) Uani 1 1 d U . .
O64 O 0.3921(3) 0.2762(6) 1.0094(5) 0.077(4) Uani 1 1 d U . .
O65 O 0.3992(3) 0.3088(5) 0.9293(4) 0.063(3) Uani 1 1 d U . .
O66 O 0.4088(3) 0.4032(5) 0.9187(5) 0.075(4) Uani 1 1 d U . .
O67 O 0.4369(3) 0.3306(5) 0.8829(4) 0.060(3) Uani 1 1 d U . .
```

```
O68 O 0.4752(3) 0.2821(5) 0.8448(4) 0.064(4) Uani 1 1 d U . .
O69 O 0.4361(3) 0.2318(5) 0.8791(4) 0.059(3) Uani 1 1 d U . .
O70 O 0.4575(3) 0.1551(5) 0.9333(5) 0.073(4) Uani 1 1 d U . .
O71 O 0.4229(3) 0.2211(5) 0.9584(4) 0.063(3) Uani 1 1 d U . .
O72 O 0.3256(3) 0.1434(5) 0.7584(4) 0.057(3) Uani 1 1 d U . .
O73 O 0.3357(3) 0.2125(4) 0.7112(4) 0.052(3) Uani 1 1 d U . .
O74 O 0.2922(3) 0.2165(5) 0.7443(4) 0.056(3) Uani 1 1 d U . .
O75 O 0.1442(14) 0.516(2) 0.8092 0.30(4) Uiso 0.77(9) 1 d PDU . .
O76 O 0.1540(17) 0.497(2) 0.872(2) 0.44(3) Uiso 1 1 d DU . .
O77 O 0.2590(16) 0.092(3) 0.616(2) 0.43(3) Uiso 1 1 d U . .
O78 O 0.2889(19) 0.071(3) 0.598(3) 0.51(4) Uiso 1 1 d DU . .
O091 O 0.3386(3) 0.1103(5) 0.9283(5) 0.074(4) Uani 1 1 d U . .
Si1 Si 0.14627(11) 0.26561(19) 0.67679(17) 0.0423(12) Uani 1 1 d U .
.
Si2 Si 0.36290(10) 0.25073(19) 0.83969(17) 0.0396(12) Uani 1 1 d U .
.
P1 P 0.17981(12) 0.3636(2) 0.80312(19) 0.0574(15) Uani 1 1 d U . .
P2 P 0.31074(11) 0.1850(2) 0.72615(19) 0.0535(14) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.119296(17) 0.29453(3) 0.76372(3) 0.0538(3) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.131137(18) 0.37944(3) 0.70112(3) 0.0568(3) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.157110(19) 0.35631(3) 0.60600(3) 0.0592(3) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.212068(18) 0.25817(3) 0.64313(3) 0.0533(2) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.199580(18) 0.17146(3) 0.70431(3) 0.0522(2) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.130184(18) 0.17306(3) 0.73962(3) 0.0561(3) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.071288(18) 0.22783(4) 0.66711(3) 0.0601(3) Uani 1 1 d U . .
W8 W 0.085413(19) 0.32578(4) 0.59565(3) 0.0635(3) Uani 1 1 d U . .
W9 W 0.117580(19) 0.15737(3) 0.63103(3) 0.0607(3) Uani 1 1 d U . .
W10 W 0.13170(2) 0.25331(4) 0.56167(3) 0.0636(3) Uani 1 1 d U . .
W11 W 0.300384(17) 0.25896(3) 0.87975(3) 0.0528(2) Uani 1 1 d U . .
W12 W 0.311850(17) 0.34514(3) 0.81843(3) 0.0527(2) Uani 1 1 d U . .
W13 W 0.378728(18) 0.34556(3) 0.77633(3) 0.0563(3) Uani 1 1 d U . .
W14 W 0.382091(18) 0.22431(3) 0.74545(3) 0.0535(2) Uani 1 1 d U . .
W15 W 0.369968(18) 0.13823(3) 0.80627(3) 0.0555(3) Uani 1 1 d U . .
W16 W 0.352831(19) 0.15691(3) 0.90944(3) 0.0601(3) Uani 1 1 d U . .
W17 W 0.382445(19) 0.25763(4) 0.95494(3) 0.0625(3) Uani 1 1 d U . .
W18 W 0.395374(18) 0.35537(3) 0.88614(3) 0.0601(3) Uani 1 1 d U . .
W19 W 0.436806(17) 0.28388(3) 0.84193(3) 0.0581(3) Uani 1 1 d U . .
W20 W 0.423243(18) 0.18371(4) 0.91130(3) 0.0619(3) Uani 1 1 d U . .
Mg1 Mg 0.25966(13) 0.2542(2) 0.7608(2) 0.0467(15) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
O1 0.034(5) 0.067(7) 0.058(7) -0.001(6) 0.010(5) 0.001(5)
O2 0.031(7) 0.073(9) 0.066(7) -0.011(6) 0.016(6) -0.007(6)
O3 0.033(6) 0.079(6) 0.066(7) 0.001(5) 0.015(5) 0.012(5)
O4 0.048(8) 0.075(6) 0.082(10) 0.005(6) 0.024(7) 0.005(6)
O5 0.037(6) 0.077(8) 0.063(6) -0.002(5) 0.017(5) 0.001(6)
O6 0.038(6) 0.067(7) 0.053(5) 0.006(5) 0.009(5) -0.001(6)
O7 0.039(7) 0.090(7) 0.052(8) 0.011(6) 0.011(6) 0.008(6)
O8 0.028(5) 0.078(6) 0.062(8) 0.005(5) 0.009(5) 0.011(4)
O9 0.028(6) 0.063(7) 0.064(5) -0.005(5) 0.001(4) 0.000(5)
O10 0.040(7) 0.103(10) 0.061(7) -0.003(7) 0.020(6) 0.013(7)
O11 0.023(6) 0.070(5) 0.057(6) -0.021(5) 0.008(5) 0.006(5)
O12 0.047(8) 0.073(6) 0.061(8) -0.008(6) 0.001(6) 0.020(6)
O13 0.029(5) 0.072(6) 0.057(6) -0.003(5) 0.007(5) 0.000(4)
O14 0.018(5) 0.082(8) 0.062(6) -0.006(6) 0.005(4) -0.001(5)
O15 0.032(7) 0.078(8) 0.071(6) 0.002(6) 0.013(6) -0.008(6)
O16 0.020(5) 0.068(5) 0.053(6) 0.005(4) 0.011(5) -0.001(4)
O17 0.024(6) 0.073(5) 0.047(5) 0.005(4) 0.007(5) 0.008(4)
O18 0.022(5) 0.069(5) 0.051(6) -0.006(5) 0.009(4) 0.008(4)
```

O19 0.023(4) 0.075(5) 0.056(5) -0.005(4) 0.011(4) -0.001(4)
O20 0.026(5) 0.073(6) 0.053(4) 0.000(4) 0.006(4) 0.004(4)
O21 0.024(5) 0.077(6) 0.058(5) 0.005(5) 0.011(4) 0.004(5)
O22 0.034(5) 0.061(7) 0.060(5) 0.016(5) 0.007(4) 0.010(5)
O23 0.025(5) 0.091(7) 0.050(7) 0.013(6) 0.001(5) 0.014(4)
O24 0.037(6) 0.096(6) 0.053(6) 0.002(5) 0.013(5) 0.013(5)
O25 0.036(5) 0.072(7) 0.050(6) 0.004(5) 0.012(4) 0.002(4)
O26 0.027(4) 0.062(7) 0.063(6) -0.006(5) 0.003(4) 0.004(4)
O27 0.030(6) 0.075(6) 0.074(5) -0.005(4) 0.010(5) -0.003(5)
O28 0.018(5) 0.076(7) 0.068(7) 0.000(5) 0.010(4) -0.009(5)
O29 0.016(5) 0.126(11) 0.071(9) -0.007(7) 0.007(5) -0.002(5)
O30 0.025(6) 0.093(7) 0.065(6) -0.004(5) 0.006(6) -0.002(5)
O31 0.020(5) 0.134(12) 0.079(9) 0.014(8) 0.000(6) 0.017(6)
O32 0.036(6) 0.095(8) 0.053(6) 0.012(5) 0.001(5) 0.006(5)
O33 0.047(8) 0.102(10) 0.061(6) -0.002(6) 0.010(6) 0.010(7)
O34 0.024(6) 0.085(6) 0.055(6) -0.014(5) -0.003(5) 0.005(5)
O35 0.047(8) 0.071(7) 0.071(8) -0.009(6) -0.005(7) 0.002(6)
O36 0.023(5) 0.092(8) 0.069(7) -0.005(5) 0.001(5) 0.002(5)
O37 0.032(5) 0.079(10) 0.045(7) 0.005(7) 0.010(5) 0.008(6)
O38 0.035(6) 0.067(8) 0.075(8) 0.006(7) 0.013(6) 0.015(5)
O39 0.017(5) 0.070(8) 0.056(5) -0.011(5) 0.009(4) 0.008(5)
O40 0.027(5) 0.073(6) 0.066(6) -0.008(5) 0.004(5) 0.006(5)
O41 0.034(7) 0.082(9) 0.063(7) -0.016(7) 0.020(6) -0.005(6)
O42 0.023(6) 0.074(6) 0.067(7) -0.018(5) 0.011(5) 0.003(5)
O43 0.036(7) 0.071(6) 0.092(10) -0.012(6) 0.014(7) 0.004(6)
O44 0.023(5) 0.078(9) 0.055(7) -0.001(5) 0.003(5) 0.012(5)
O45 0.036(7) 0.078(8) 0.076(7) 0.012(6) 0.007(6) -0.009(6)
O46 0.027(6) 0.070(5) 0.059(7) 0.000(5) 0.013(5) 0.009(5)
O47 0.045(7) 0.083(9) 0.074(7) -0.010(7) 0.036(6) 0.002(7)
O48 0.028(6) 0.070(5) 0.077(7) -0.009(5) 0.027(6) 0.005(5)
O49 0.043(8) 0.059(6) 0.098(10) 0.006(6) 0.024(7) 0.009(5)
O50 0.021(6) 0.066(7) 0.065(5) 0.005(5) 0.007(5) 0.002(5)
O51 0.015(5) 0.079(6) 0.067(8) 0.004(5) 0.013(5) 0.000(4)
O52 0.021(5) 0.070(6) 0.052(6) -0.002(5) 0.012(5) 0.007(4)
O53 0.016(6) 0.068(5) 0.057(5) -0.005(4) 0.014(5) 0.007(4)
O54 0.015(5) 0.075(6) 0.059(5) 0.001(4) 0.004(4) 0.002(4)
O55 0.016(4) 0.068(5) 0.059(6) -0.002(4) 0.004(4) 0.006(4)
O56 0.030(5) 0.088(8) 0.046(6) -0.008(6) 0.006(4) 0.000(5)
O57 0.026(4) 0.090(8) 0.053(6) -0.014(6) 0.011(4) -0.002(5)
O58 0.019(6) 0.069(6) 0.087(6) -0.004(4) 0.021(5) -0.002(5)
O59 0.022(5) 0.088(8) 0.064(7) -0.003(5) 0.012(5) 0.001(5)
O60 0.022(5) 0.090(8) 0.077(6) -0.015(6) 0.021(5) -0.004(5)
O61 0.025(5) 0.074(8) 0.073(6) 0.006(5) 0.020(4) 0.004(5)
O62 0.027(5) 0.086(7) 0.066(7) 0.014(6) 0.007(5) 0.012(5)
O63 0.030(6) 0.099(6) 0.050(6) 0.005(5) 0.005(5) 0.010(5)
O64 0.028(7) 0.132(12) 0.065(6) -0.024(7) 0.007(6) -0.009(7)
O65 0.023(6) 0.092(7) 0.067(6) -0.013(5) 0.004(6) 0.002(5)
O66 0.033(7) 0.098(8) 0.103(9) -0.041(7) 0.032(7) -0.017(7)
O67 0.019(5) 0.079(7) 0.073(7) -0.006(5) 0.003(5) 0.002(5)
O68 0.014(5) 0.102(10) 0.072(8) 0.000(7) 0.009(5) 0.000(5)
O69 0.025(6) 0.077(6) 0.078(7) -0.004(5) 0.021(6) 0.012(5)
O70 0.014(5) 0.094(10) 0.097(10) 0.006(7) -0.003(6) 0.005(5)
O71 0.030(5) 0.093(8) 0.058(6) 0.008(5) 0.004(5) 0.000(5)
O72 0.029(5) 0.076(7) 0.066(7) 0.013(6) 0.014(5) 0.004(5)
O73 0.026(5) 0.070(8) 0.057(7) -0.002(6) 0.012(5) 0.002(5)
O74 0.028(6) 0.075(8) 0.066(8) -0.004(6) 0.018(6) 0.010(5)
O091 0.035(7) 0.099(8) 0.077(9) 0.030(7) 0.004(7) 0.002(6)
Si1 0.019(2) 0.057(3) 0.047(3) -0.003(2) 0.005(2) 0.007(2)
Si2 0.018(2) 0.059(3) 0.042(3) -0.003(2) 0.010(2) 0.015(2)
P1 0.029(3) 0.073(4) 0.067(4) -0.006(3) 0.012(3) 0.002(3)
P2 0.027(3) 0.065(4) 0.069(4) 0.003(3) 0.015(3) 0.009(2)
W1 0.0238(4) 0.0778(7) 0.0596(6) -0.0038(5) 0.0130(4) 0.0012(4)
W2 0.0289(5) 0.0714(6) 0.0677(6) -0.0011(5) 0.0126(4) 0.0085(4)
W3 0.0334(5) 0.0803(7) 0.0618(6) 0.0074(5) 0.0124(4) 0.0094(4)
W4 0.0271(4) 0.0760(7) 0.0557(6) -0.0026(5) 0.0118(4) 0.0055(4)
W5 0.0266(4) 0.0657(6) 0.0597(6) -0.0054(5) 0.0079(4) 0.0039(4)

```
W6 0.0280(5) 0.0740(7) 0.0626(6) -0.0020(5) 0.0094(4) -0.0026(4)
W7 0.0208(4) 0.0869(7) 0.0666(6) -0.0047(5) 0.0060(4) -0.0015(4)
W8 0.0278(5) 0.0914(7) 0.0631(6) 0.0029(5) 0.0031(4) 0.0101(5)
W9 0.0319(5) 0.0788(7) 0.0634(6) -0.0118(5) 0.0046(4) -0.0023(4)
W10 0.0357(5) 0.0950(8) 0.0528(6) -0.0040(5) 0.0042(4) 0.0057(5)
W11 0.0223(4) 0.0822(7) 0.0536(5) -0.0082(5) 0.0119(4) 0.0019(4)
W12 0.0233(4) 0.0676(6) 0.0645(6) -0.0105(5) 0.0105(4) 0.0038(4)
W13 0.0279(5) 0.0723(6) 0.0679(6) 0.0008(5) 0.0146(4) -0.0012(4)
W14 0.0264(4) 0.0738(6) 0.0631(6) -0.0041(5) 0.0186(4) 0.0031(4)
W15 0.0266(4) 0.0685(6) 0.0707(6) 0.0002(5) 0.0148(4) 0.0088(4)
W16 0.0289(5) 0.0869(7) 0.0619(6) 0.0110(5) 0.0108(4) 0.0039(4)
W17 0.0269(5) 0.1041(8) 0.0517(6) -0.0060(5) 0.0059(4) 0.0008(5)
W18 0.0252(5) 0.0828(7) 0.0681(6) -0.0149(5) 0.0094(4) -0.0034(4)
W19 0.0204(4) 0.0841(7) 0.0686(6) -0.0028(5) 0.0126(4) 0.0020(4)
W20 0.0238(4) 0.0905(7) 0.0664(6) 0.0067(5) 0.0076(4) 0.0088(4)
Mg1 0.022(3) 0.060(4) 0.056(3) -0.003(3) 0.011(3) 0.005(3)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.51(4) . ?
C1 P1 1.85(2) . ?
C1 H1A 0.9900 . ?
C1 H1B 0.9900 . ?
C1S C2S 1.40(4) . ?
C1S N1S 1.53(3) . ?
C2 C3 1.67(3) . ?
C2 H2A 0.9900 . ?
C2 H2B 0.9900 . ?
C3 O76 1.01(6) . ?
C3 O75 1.17(4) . ?
C4 C5 1.49(3) . ?
C4 P2 1.755(19) . ?
C4 H4A 0.9900 . ?
C4 H4B 0.9900 . ?
C5 C6 1.60(4) . ?
C5 H5A 0.9900 . ?
C5 H5B 0.9900 . ?
C6 O77 1.10(9) . ?
C6 O78 1.37(7) . ?
C7 C9 1.58(4) . ?
C7 N2 1.59(4) . ?
C7 H7A 0.9900 . ?
C7 H7B 0.9900 . ?
C8 C9 1.3900 . ?
C8 C13 1.3900 . ?
C8 H8 0.9500 . ?
```

```
C9 C10 1.3900 . ?
C10 C11 1.3900 . ?
C10 H10 0.9500 . ?
C11 C12 1.3900 . ?
C11 H11 0.9500 . ?
C12 C13 1.3900 . ?
C12 H12 0.9500 . ?
C13 H13 0.9500 . ?
C14 N1 1.56(4) . ?
C14 C16 1.61(4) . ?
C14 H14A 0.9900 . ?
C14 H14B 0.9900 . ?
C15 C16 1.3900 . ?
C15 C20 1.3900 . ?
C15 H15 0.9500 . ?
C16 C17 1.3900 . ?
C17 C18 1.3900 . ?
C17 H17 0.9500 . ?
C18 C19 1.3900 . ?
C18 H18 0.9500 . ?
C19 C20 1.3900 . ?
C19 H19 0.9500 . ?
C20 H20 0.9500 . ?
C21 C22 1.46(4) . ?
C21 N3 1.53(3) . ?
C21 H21A 0.9900 . ?
C21 H21B 0.9900 . ?
C22 C23 1.60(2) . ?
C22 H22A 0.9900 . ?
C22 H22B 0.9900 . ?
C23 C24 1.60(3) . ?
C23 H23A 0.9900 . ?
C23 H23B 0.9900 . ?
C24 H24A 0.9800 . ?
C24 H24B 0.9800 . ?
C24 H24C 0.9800 . ?
C25 N3 1.51(3) . ?
C25 C26 1.52(4) . ?
C25 H25A 0.9900 . ?
C25 H25B 0.9900 . ?
C26 C27 1.61(3) . ?
C26 H26A 0.9900 . ?
C26 H26B 0.9900 . ?
C27 C28 1.43(3) . ?
C27 H27A 0.9900 . ?
C27 H27B 0.9900 . ?
C28 H28A 0.9800 . ?
C28 H28B 0.9800 . ?
C28 H28C 0.9800 . ?
C29 C30 1.47(3) . ?
C29 N3 1.50(3) . ?
C29 H29A 0.9900 . ?
C29 H29B 0.9900 . ?
C30 C31 1.46(3) . ?
C30 H30A 0.9900 . ?
C30 H30B 0.9900 . ?
C31 C32 1.48(5) . ?
C31 H31A 0.9900 . ?
C31 H31B 0.9900 . ?
C32 H32A 0.9800 . ?
C32 H32B 0.9800 . ?
C32 H32C 0.9800 . ?
C33 C34 1.45(4) . ?
C33 N3 1.54(3) . ?
C33 H33A 0.9900 . ?
C33 H33B 0.9900 . ?
```

```
C34 C35 1.51(5) . ?
C34 H34A 0.9900 . ?
C34 H34B 0.9900 . ?
C35 C36 1.50(6) . ?
C35 H35A 0.9900 . ?
C35 H35B 0.9900 . ?
C36 H36A 0.9800 . ?
C36 H36B 0.9800 . ?
C36 H36C 0.9800 . ?
C37 C38 1.37(10) . ?
C37 N4 1.74(9) . ?
C37 H37A 0.9900 . ?
C37 H37B 0.9900 . ?
C38 C39 1.59(4) . ?
C38 H38A 0.9900 . ?
C38 H38B 0.9900 . ?
C39 C40 1.57(3) . ?
C39 H39A 0.9900 . ?
C39 H39B 0.9900 . ?
C40 H40A 0.9800 . ?
C40 H40B 0.9800 . ?
C40 H40C 0.9800 . ?
C41 C42 1.50(4) . ?
C41 N4 1.56(4) . ?
C41 H41A 0.9900 . ?
C41 H41B 0.9900 . ?
C42 C43 1.58(4) . ?
C42 H42A 0.9900 . ?
C42 H42B 0.9900 . ?
C43 C44 1.47(4) . ?
C43 H43A 0.9900 . ?
C43 H43B 0.9900 . ?
C44 H44A 0.9800 . ?
C44 H44B 0.9800 . ?
C44 H44C 0.9800 . ?
C45 C46 1.53(4) . ?
C45 N4 1.60(3) . ?
C45 H45A 0.9900 . ?
C45 H45B 0.9900 . ?
C46 C47 1.65(4) . ?
C46 H46A 0.9900 . ?
C46 H46B 0.9900 . ?
C47 C48 1.61(3) . ?
C47 H47A 0.9900 . ?
C47 H47B 0.9900 . ?
C48 H48A 0.9800 . ?
C48 H48B 0.9800 . ?
C48 H48C 0.9800 . ?
C49 C50 1.52(3) . ?
C49 N4 1.62(3) . ?
C49 H49A 0.9900 . ?
C49 H49B 0.9900 . ?
C50 C51 1.47(3) . ?
C50 H50A 0.9900 . ?
C50 H50B 0.9900 . ?
C51 C52 1.46(3) . ?
C51 H51A 0.9900 . ?
C51 H51B 0.9900 . ?
C52 H52A 0.9800 . ?
C52 H52B 0.9800 . ?
C52 H52C 0.9800 . ?
C53 C54 1.50(3) . ?
C53 N5 1.53(4) . ?
C53 H53A 0.9900 . ?
C53 H53B 0.9900 . ?
C54 C55 1.55(3) . ?
```

```
C54 H54A 0.9900 . ?
C54 H54B 0.9900 . ?
C55 C56 1.37(3) . ?
C55 H55A 0.9900 . ?
C55 H55B 0.9900 . ?
C56 H56A 0.9800 . ?
C56 H56B 0.9800 . ?
C56 H56C 0.9800 . ?
C57 C58 1.38(6) . ?
C57 N5 1.53(3) . ?
C57 H57A 0.9900 . ?
C57 H57B 0.9900 . ?
C58 C59 1.61(3) . ?
C58 H58A 0.9900 . ?
C58 H58B 0.9900 . ?
C59 C60 1.52(3) . ?
C59 H59A 0.9900 . ?
C59 H59B 0.9900 . ?
C60 H60A 0.9800 . ?
C60 H60B 0.9800 . ?
C60 H60C 0.9800 . ?
C61 N5 1.51(3) . ?
C61 C62 1.52(3) . ?
C61 H61A 0.9900 . ?
C61 H61B 0.9900 . ?
C62 C63 1.57(3) . ?
C62 H62A 0.9900 . ?
C62 H62B 0.9900 . ?
C63 C64 1.46(5) . ?
C63 H63A 0.9900 . ?
C63 H63B 0.9900 . ?
C64 H64A 0.9800 . ?
C64 H64B 0.9800 . ?
C64 H64C 0.9800 . ?
C65 C66 1.53(3) . ?
C65 N5 1.60(5) . ?
C65 H65A 0.9900 . ?
C65 H65B 0.9900 . ?
C66 C67 1.52(4) . ?
C66 H66A 0.9900 . ?
C66 H66B 0.9900 . ?
C67 C68 1.60(4) . ?
C67 H67A 0.9900 . ?
C67 H67B 0.9900 . ?
C68 H68A 0.9800 . ?
C68 H68B 0.9800 . ?
C68 H68C 0.9800 . ?
C69 N6 1.47(3) . ?
C69 C70 1.57(3) . ?
C69 H69A 0.9900 . ?
C69 H69B 0.9900 . ?
C70 C71 1.43(3) . ?
C70 H70A 0.9900 . ?
C70 H70B 0.9900 . ?
C71 C72 1.49(3) . ?
C71 H71A 0.9900 . ?
C71 H71B 0.9900 . ?
C72 H72A 0.9800 . ?
C72 H72B 0.9800 . ?
C72 H72C 0.9800 . ?
C73 C74 1.30(3) . ?
C73 N6 1.53(3) . ?
C73 H73A 0.9900 . ?
C73 H73B 0.9900 . ?
C74 C75 1.45(2) . ?
C74 H74A 0.9900 . ?
```

C74 H74B 0.9900 . ?
C75 C76 1.44(3) . ?
C75 H75A 0.9900 . ?
C75 H75B 0.9900 . ?
C76 H76A 0.9800 . ?
C76 H76B 0.9800 . ?
C76 H76C 0.9800 . ?
C77 C78 1.42(3) . ?
C77 N7 1.47(3) . ?
C77 H77A 0.9900 . ?
C77 H77B 0.9900 . ?
C78 C79 1.49(4) . ?
C78 H78A 0.9900 . ?
C78 H78B 0.9900 . ?
C79 C80 1.47(5) . ?
C79 H79A 0.9900 . ?
C79 H79B 0.9900 . ?
C80 H80A 0.9800 . ?
C80 H80B 0.9800 . ?
C80 H80C 0.9800 . ?
C81 C82 1.43(4) . ?
C81 N7 1.47(3) . ?
C81 H81A 0.9900 . ?
C81 H81B 0.9900 . ?
C82 C83 1.49(3) . ?
C82 H82A 0.9900 . ?
C82 H82B 0.9900 . ?
C83 C84 1.42(4) . ?
C83 H83A 0.9900 . ?
C83 H83B 0.9900 . ?
C84 H84A 0.9800 . ?
C84 H84B 0.9800 . ?
C84 H84C 0.9800 . ?
C85 C86 1.47(3) . ?
C85 N8 1.50(3) . ?
C85 H85A 0.9900 . ?
C85 H85B 0.9900 . ?
C86 C87 1.37(3) . ?
C86 C91 1.41(3) . ?
C87 C88 1.43(4) . ?
C87 H87 0.9500 . ?
C88 C89 1.37(4) . ?
C88 H88 0.9500 . ?
C89 C90 1.24(3) . ?
C89 H89 0.9500 . ?
C90 C91 1.39(4) . ?
C90 H90 0.9500 . ?
C91 H91 0.9500 . ?
C92 N9 1.47(2) . ?
C92 C93 1.52(3) . ?
C92 H92A 0.9900 . ?
C92 H92B 0.9900 . ?
C93 C94 1.37(3) . ?
C93 C98 1.41(3) . ?
C94 C95 1.37(4) . ?
C94 H94 0.9500 . ?
C95 C96 1.28(4) . ?
C95 H95 0.9500 . ?
C96 C97 1.37(3) . ?
C96 H96 0.9500 . ?
C97 C98 1.30(3) . ?
C97 H97 0.9500 . ?
C98 H98 0.9500 . ?
C99 C100 1.45(3) . ?
C99 N10 1.51(2) . ?
C99 H99A 0.9900 . ?

C99 H99B 0.9900 . ?
C100 C105 1.37(3) . ?
C100 C101 1.40(3) . ?
C101 C102 1.37(3) . ?
C101 H101 0.9500 . ?
C102 C103 1.35(3) . ?
C102 H102 0.9500 . ?
C103 C104 1.35(3) . ?
C103 H103 0.9500 . ?
C104 C105 1.47(3) . ?
C104 H104 0.9500 . ?
C105 H105 0.9500 . ?
C106 N11 1.33(4) . ?
C106 C107 1.99(4) . ?
C106 H10A 0.9900 . ?
C106 H10B 0.9900 . ?
C107 C108 1.38(3) . ?
C107 C112 1.41(4) . ?
C108 C109 1.37(3) . ?
C108 H108 0.9500 . ?
C109 C110 1.37(3) . ?
C109 H109 0.9500 . ?
C110 C111 1.32(4) . ?
C110 H110 0.9500 . ?
C111 C112 1.42(4) . ?
C111 H111 0.9500 . ?
C112 H112 0.9500 . ?
C113 N12 1.35(3) . ?
C113 C114 1.67(4) . ?
C113 H11C 0.9900 . ?
C113 H11D 0.9900 . ?
C114 C119 1.36(4) . ?
C114 C115 1.49(5) . ?
C115 C116 1.32(6) . ?
C115 H115 0.9500 . ?
C116 C117 1.49(6) . ?
C116 H116 0.9500 . ?
C117 C118 1.48(6) . ?
C117 H117 0.9500 . ?
C118 C119 1.45(5) . ?
C118 H118 0.9500 . ?
C119 H119 0.9500 . ?
N6 C69 1.47(3) 2_656 ?
N6 C73 1.53(3) 2_656 ?
N7 C81 1.47(3) 2_556 ?
N7 C77 1.47(3) 2_556 ?
O1 P1 1.567(13) . ?
O1 W1 2.056(12) . ?
O2 W1 1.718(12) . ?
O3 W2 1.905(13) . ?
O3 W1 1.946(13) . ?
O4 W2 1.712(14) . ?
O5 P1 1.550(14) . ?
O5 W2 2.091(12) . ?
O6 W2 1.904(12) . ?
O6 W3 1.941(12) . ?
O7 W3 1.691(13) . ?
O8 W3 1.870(12) . ?
O8 W4 1.960(13) . ?
O9 W4 1.772(12) . ?
O9 Mg1 2.123(14) . ?
O10 W4 1.708(13) . ?
O11 W4 1.911(13) . ?
O11 W5 1.935(13) . ?
O12 W5 1.711(13) . ?
O13 W5 1.788(12) . ?

```
O13 Mg1 2.062(14) . ?
O14 W6 1.906(11) . ?
O14 W5 1.939(12) . ?
O15 W6 1.713(13) . ?
O16 W1 1.923(12) . ?
O16 W6 1.933(12) . ?
O17 Si1 1.614(13) . ?
O17 W1 2.218(12) . ?
O17 W2 2.249(12) . ?
O18 Si1 1.627(12) . ?
O18 W4 2.265(12) . ?
O18 W5 2.317(12) . ?
O19 Si1 1.608(13) . ?
O19 W7 2.316(11) . ?
O19 W9 2.336(12) . ?
O19 W6 2.337(13) . ?
O20 Si1 1.638(13) . ?
O20 W10 2.292(12) . ?
O20 W3 2.332(13) . ?
O20 W8 2.364(11) . ?
O21 W1 1.834(12) . ?
O21 W7 2.001(13) . ?
O22 W2 1.831(12) . ?
O22 W8 2.005(13) . ?
O23 W8 1.900(13) . ?
O23 W3 1.924(11) . ?
O24 W3 1.877(13) . ?
O24 W10 1.953(14) . ?
O25 W10 1.813(12) . ?
O25 W4 2.107(12) . ?
O26 W9 1.805(11) . ?
O26 W5 2.118(11) . ?
O27 W6 1.894(13) . ?
O27 W9 1.980(14) . ?
O28 W7 1.912(13) . ?
O28 W6 1.913(11) . ?
O29 W7 1.747(11) . ?
O30 W7 1.898(14) . ?
O30 W8 1.918(14) . ?
O31 W8 1.717(12) . ?
O32 W8 1.841(14) . ?
O32 W10 2.037(13) . ?
O33 W10 1.703(14) . ?
O34 W10 1.874(14) . ?
O34 W9 1.942(14) . ?
O35 W9 1.705(13) . ?
O36 W7 1.814(14) . ?
O36 W9 2.038(12) . ?
O37 P1 1.515(12) . ?
O38 Mg1 2.126(13) . ?
O39 W11 1.767(11) . ?
O39 Mg1 2.091(13) . ?
O40 W12 1.765(12) . ?
O40 Mg1 2.099(14) . ?
O41 W11 1.728(12) . ?
O42 W11 1.923(13) . ?
O42 W12 1.924(13) . ?
O43 W12 1.710(13) . ?
O44 W13 1.909(11) . ?
O44 W12 1.959(12) . ?
O45 W13 1.682(13) . ?
O46 W14 1.910(12) . ?
O46 W13 1.916(13) . ?
O47 W14 1.697(12) . ?
O48 W14 1.913(13) . ?
O48 W15 1.939(13) . ?
```

```
O49 W15 1.707(13) . ?
O50 W16 1.918(13) . ?
O50 W15 1.927(12) . ?
O51 W16 1.881(11) . ?
O51 W11 1.970(13) . ?
O52 Si2 1.615(11) . ?
O52 W11 2.216(11) . ?
O52 W12 2.240(12) . ?
O53 Si2 1.576(12) . ?
O53 W15 2.204(12) . ?
O53 W14 2.233(11) . ?
O54 Si2 1.586(13) . ?
O54 W17 2.332(12) . ?
O54 W20 2.344(11) . ?
O54 W16 2.374(12) . ?
O55 Si2 1.646(13) . ?
O55 W18 2.286(12) . ?
O55 W19 2.289(10) . ?
O55 W13 2.343(12) . ?
O56 W17 1.819(12) . ?
O56 W11 2.094(11) . ?
O57 W18 1.828(11) . ?
O57 W12 2.077(11) . ?
O58 W13 1.887(13) . ?
O58 W18 1.950(13) . ?
O59 W19 1.891(13) . ?
O59 W13 1.938(11) . ?
O60 W14 1.807(12) . ?
O60 W19 2.079(13) . ?
O61 W15 1.813(12) . ?
O61 W20 2.041(13) . ?
O62 W16 1.905(11) . ?
O62 W20 1.959(13) . ?
O63 W16 1.893(13) . ?
O63 W17 1.945(14) . ?
O64 W17 1.707(13) . ?
O65 W18 1.867(14) . ?
O65 W17 1.940(14) . ?
O66 W18 1.698(13) . ?
O67 W19 1.853(13) . ?
O67 W18 2.056(12) . ?
O68 W19 1.729(11) . ?
O69 W19 1.897(14) . ?
O69 W20 1.906(13) . ?
O70 W20 1.701(12) . ?
O71 W20 1.830(14) . ?
O71 W17 2.092(13) . ?
O72 P2 1.565(13) . ?
O72 W15 2.102(12) . ?
O73 P2 1.577(13) . ?
O73 W14 2.071(11) . ?
O74 P2 1.472(13) . ?
O74 Mg1 2.033(13) . ?
O77 O78 1.74(9) . ?
O091 W16 1.671(14) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 118(2) . . ?
C2 C1 H1A 107.8 . . ?
```

```
P1 C1 H1A 107.9 . . ?
C2 C1 H1B 107.8 . . ?
P1 C1 H1B 107.8 . . ?
H1A C1 H1B 107.2 . . ?
C2S C1S N1S 153(4) . . ?
C1 C2 C3 127(3) . . ?
C1 C2 H2A 105.5 . . ?
C3 C2 H2A 105.6 . . ?
C1 C2 H2B 105.5 . . ?
C3 C2 H2B 105.4 . . ?
H2A C2 H2B 106.1 . . ?
O76 C3 O75 128(8) . . ?
O76 C3 C2 104(6) . . ?
O75 C3 C2 94(4) . . ?
C5 C4 P2 117.4(17) . . ?
C5 C4 H4A 108.0 . . ?
P2 C4 H4A 108.0 . . ?
C5 C4 H4B 108.0 . . ?
P2 C4 H4B 107.9 . . ?
H4A C4 H4B 107.2 . . ?
C4 C5 C6 109(4) . . ?
C4 C5 H5A 109.8 . . ?
C6 C5 H5A 109.8 . . ?
C4 C5 H5B 109.8 . . ?
C6 C5 H5B 109.9 . . ?
H5A C5 H5B 108.3 . . ?
O77 C6 O78 89(7) . . ?
O77 C6 C5 105(6) . . ?
O78 C6 C5 100(5) . . ?
C9 C7 N2 89(6) . . ?
C9 C7 H7A 113.6 . . ?
N2 C7 H7A 113.5 . . ?
C9 C7 H7B 113.9 . . ?
N2 C7 H7B 114.0 . . ?
H7A C7 H7B 110.9 . . ?
C9 C8 C13 120.0 . . ?
C9 C8 H8 119.9 . . ?
C13 C8 H8 120.1 . . ?
C8 C9 C10 120.0 . . ?
C8 C9 C7 130(9) . . ?
C10 C9 C7 103(9) . . ?
C9 C10 C11 120.0 . . ?
C9 C10 H10 120.0 . . ?
C11 C10 H10 120.0 . . ?
C12 C11 C10 120.0 . . ?
C12 C11 H11 120.0 . . ?
C10 C11 H11 120.0 . . ?
C11 C12 C13 120.0 . . ?
C11 C12 H12 120.0 . . ?
C13 C12 H12 120.0 . . ?
C12 C13 C8 120.0 . . ?
C12 C13 H13 120.0 . . ?
C8 C13 H13 120.0 . . ?
N1 C14 C16 119(7) . . ?
N1 C14 H14A 107.9 . . ?
C16 C14 H14A 107.9 . . ?
N1 C14 H14B 107.3 . . ?
C16 C14 H14B 107.3 . . ?
H14A C14 H14B 107.0 . . ?
C16 C15 C20 120.0 . . ?
C16 C15 H15 120.0 . . ?
C20 C15 H15 120.0 . . ?
C15 C16 C17 120.0 . . ?
C15 C16 C14 125(8) . . ?
C17 C16 C14 108(8) . . ?
C18 C17 C16 120.0 . . ?
```

```
C18 C17 H17 120.0 . . ?
C16 C17 H17 120.0 . . ?
C19 C18 C17 120.0 . . ?
C19 C18 H18 120.0 . . ?
C17 C18 H18 120.0 . . ?
C20 C19 C18 120.0 . . ?
C20 C19 H19 120.0 . . ?
C18 C19 H19 120.0 . . ?
C19 C20 C15 120.0 . . ?
C19 C20 H20 120.0 . . ?
C15 C20 H20 120.0 . . ?
C22 C21 N3 113(2) . . ?
C22 C21 H21A 109.1 . . ?
N3 C21 H21A 109.0 . . ?
C22 C21 H21B 109.1 . . ?
N3 C21 H21B 109.1 . . ?
H21A C21 H21B 107.8 . . ?
C21 C22 C23 107(3) . . ?
C21 C22 H22A 110.4 . . ?
C23 C22 H22A 110.3 . . ?
C21 C22 H22B 110.4 . . ?
C23 C22 H22B 110.4 . . ?
H22A C22 H22B 108.6 . . ?
C22 C23 C24 113(3) . . ?
C22 C23 H23A 108.9 . . ?
C24 C23 H23A 109.0 . . ?
C22 C23 H23B 109.0 . . ?
C24 C23 H23B 109.0 . . ?
H23A C23 H23B 107.8 . . ?
C23 C24 H24A 109.4 . . ?
C23 C24 H24B 109.5 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.6 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
N3 C25 C26 111(2) . . ?
N3 C25 H25A 109.3 . . ?
C26 C25 H25A 109.3 . . ?
N3 C25 H25B 109.4 . . ?
C26 C25 H25B 109.4 . . ?
H25A C25 H25B 108.0 . . ?
C25 C26 C27 106(3) . . ?
C25 C26 H26A 110.4 . . ?
C27 C26 H26A 110.4 . . ?
C25 C26 H26B 110.6 . . ?
C27 C26 H26B 110.6 . . ?
H26A C26 H26B 108.7 . . ?
C28 C27 C26 110(4) . . ?
C28 C27 H27A 109.7 . . ?
C26 C27 H27A 109.7 . . ?
C28 C27 H27B 109.7 . . ?
C26 C27 H27B 109.6 . . ?
H27A C27 H27B 108.2 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.5 . . ?
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.4 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
C30 C29 N3 115(3) . . ?
C30 C29 H29A 108.5 . . ?
N3 C29 H29A 108.4 . . ?
C30 C29 H29B 108.4 . . ?
N3 C29 H29B 108.4 . . ?
H29A C29 H29B 107.5 . . ?
C31 C30 C29 123(3) . . ?
```

```
C31 C30 H30A 106.5 . . ?
C29 C30 H30A 106.5 . . ?
C31 C30 H30B 106.5 . . ?
C29 C30 H30B 106.5 . . ?
H30A C30 H30B 106.5 . . ?
C30 C31 C32 122(4) . . ?
C30 C31 H31A 106.9 . . ?
C32 C31 H31A 106.8 . . ?
C30 C31 H31B 106.9 . . ?
C32 C31 H31B 106.8 . . ?
H31A C31 H31B 106.7 . . ?
C31 C32 H32A 109.6 . . ?
C31 C32 H32B 109.4 . . ?
H32A C32 H32B 109.5 . . ?
C31 C32 H32C 109.4 . . ?
H32A C32 H32C 109.5 . . ?
H32B C32 H32C 109.5 . . ?
C34 C33 N3 115(3) . . ?
C34 C33 H33A 108.5 . . ?
N3 C33 H33A 108.5 . . ?
C34 C33 H33B 108.5 . . ?
N3 C33 H33B 108.5 . . ?
H33A C33 H33B 107.5 . . ?
C33 C34 C35 124(4) . . ?
C33 C34 H34A 106.2 . . ?
C35 C34 H34A 106.3 . . ?
C33 C34 H34B 106.3 . . ?
C35 C34 H34B 106.3 . . ?
H34A C34 H34B 106.4 . . ?
C36 C35 C34 101(4) . . ?
C36 C35 H35A 111.6 . . ?
C34 C35 H35A 111.4 . . ?
C36 C35 H35B 111.6 . . ?
C34 C35 H35B 111.7 . . ?
H35A C35 H35B 109.4 . . ?
C35 C36 H36A 109.5 . . ?
C35 C36 H36B 109.5 . . ?
H36A C36 H36B 109.5 . . ?
C35 C36 H36C 109.5 . . ?
H36A C36 H36C 109.5 . . ?
H36B C36 H36C 109.5 . . ?
C38 C37 N4 109(8) . . ?
C38 C37 H37A 109.6 . . ?
N4 C37 H37A 109.7 . . ?
C38 C37 H37B 110.0 . . ?
N4 C37 H37B 109.9 . . ?
H37A C37 H37B 108.1 . . ?
C37 C38 C39 126(9) . . ?
C37 C38 H38A 106.2 . . ?
C39 C38 H38A 106.0 . . ?
C37 C38 H38B 105.4 . . ?
C39 C38 H38B 105.5 . . ?
H38A C38 H38B 106.1 . . ?
C40 C39 C38 126(6) . . ?
C40 C39 H39A 105.7 . . ?
C38 C39 H39A 105.5 . . ?
C40 C39 H39B 105.8 . . ?
C38 C39 H39B 106.2 . . ?
H39A C39 H39B 106.2 . . ?
C39 C40 H40A 109.6 . . ?
C39 C40 H40B 109.5 . . ?
H40A C40 H40B 109.5 . . ?
C39 C40 H40C 109.3 . . ?
H40A C40 H40C 109.5 . . ?
H40B C40 H40C 109.5 . . ?
C42 C41 N4 100(5) . . ?
```

```
C42 C41 H41A 111.6 . . ?
N4 C41 H41A 111.3 . . ?
C42 C41 H41B 111.9 . . ?
N4 C41 H41B 112.0 . . ?
H41A C41 H41B 109.4 . . ?
C41 C42 C43 104(3) . . ?
C41 C42 H42A 111.5 . . ?
C43 C42 H42A 111.1 . . ?
C41 C42 H42B 110.7 . . ?
C43 C42 H42B 110.5 . . ?
H42A C42 H42B 109.0 . . ?
C44 C43 C42 100(5) . . ?
C44 C43 H43A 111.8 . . ?
C42 C43 H43A 111.6 . . ?
C44 C43 H43B 111.9 . . ?
C42 C43 H43B 111.8 . . ?
H43A C43 H43B 109.6 . . ?
C43 C44 H44A 109.6 . . ?
C43 C44 H44B 109.5 . . ?
H44A C44 H44B 109.5 . . ?
C43 C44 H44C 109.3 . . ?
H44A C44 H44C 109.5 . . ?
H44B C44 H44C 109.5 . . ?
C46 C45 N4 98(3) . . ?
C46 C45 H45A 112.6 . . ?
N4 C45 H45A 112.3 . . ?
C46 C45 H45B 111.8 . . ?
N4 C45 H45B 112.2 . . ?
H45A C45 H45B 109.9 . . ?
C45 C46 C47 102(3) . . ?
C45 C46 H46A 111.0 . . ?
C47 C46 H46A 111.4 . . ?
C45 C46 H46B 111.7 . . ?
C47 C46 H46B 111.6 . . ?
H46A C46 H46B 109.3 . . ?
C48 C47 C46 96(2) . . ?
C48 C47 H47A 112.1 . . ?
C46 C47 H47A 112.6 . . ?
C48 C47 H47B 112.7 . . ?
C46 C47 H47B 112.5 . . ?
H47A C47 H47B 110.0 . . ?
C47 C48 H48A 109.7 . . ?
C47 C48 H48B 109.7 . . ?
H48A C48 H48B 109.5 . . ?
C47 C48 H48C 109.1 . . ?
H48A C48 H48C 109.5 . . ?
H48B C48 H48C 109.5 . . ?
C50 C49 N4 122(4) . . ?
C50 C49 H49A 106.6 . . ?
N4 C49 H49A 106.4 . . ?
C50 C49 H49B 106.8 . . ?
N4 C49 H49B 107.0 . . ?
H49A C49 H49B 106.6 . . ?
C51 C50 C49 108(3) . . ?
C51 C50 H50A 110.0 . . ?
C49 C50 H50A 110.1 . . ?
C51 C50 H50B 110.0 . . ?
C49 C50 H50B 110.2 . . ?
H50A C50 H50B 108.4 . . ?
C52 C51 C50 119(4) . . ?
C52 C51 H51A 107.3 . . ?
C50 C51 H51A 107.6 . . ?
C52 C51 H51B 107.5 . . ?
C50 C51 H51B 107.4 . . ?
H51A C51 H51B 107.0 . . ?
C51 C52 H52A 109.6 . . ?
```

```
C51 C52 H52B 109.5 . . ?
H52A C52 H52B 109.5 . . ?
C51 C52 H52C 109.3 . . ?
H52A C52 H52C 109.5 . . ?
H52B C52 H52C 109.5 . . ?
C54 C53 N5 108(3) . . ?
C54 C53 H53A 110.2 . . ?
N5 C53 H53A 110.2 . . ?
C54 C53 H53B 110.1 . . ?
N5 C53 H53B 110.1 . . ?
H53A C53 H53B 108.5 . . ?
C53 C54 C55 119(3) . . ?
C53 C54 H54A 107.4 . . ?
C55 C54 H54A 107.6 . . ?
C53 C54 H54B 107.6 . . ?
C55 C54 H54B 107.7 . . ?
H54A C54 H54B 107.0 . . ?
C56 C55 C54 112(3) . . ?
C56 C55 H55A 109.1 . . ?
C54 C55 H55A 109.0 . . ?
C56 C55 H55B 109.3 . . ?
C54 C55 H55B 109.2 . . ?
H55A C55 H55B 107.8 . . ?
C55 C56 H56A 109.3 . . ?
C55 C56 H56B 109.7 . . ?
H56A C56 H56B 109.5 . . ?
C55 C56 H56C 109.5 . . ?
H56A C56 H56C 109.5 . . ?
H56B C56 H56C 109.5 . . ?
C58 C57 N5 130(5) . . ?
C58 C57 H57A 105.1 . . ?
N5 C57 H57A 104.8 . . ?
C58 C57 H57B 104.4 . . ?
N5 C57 H57B 104.6 . . ?
H57A C57 H57B 105.7 . . ?
C57 C58 C59 116(5) . . ?
C57 C58 H58A 107.8 . . ?
C59 C58 H58A 107.8 . . ?
C57 C58 H58B 108.5 . . ?
C59 C58 H58B 108.7 . . ?
H58A C58 H58B 107.3 . . ?
C60 C59 C58 99(3) . . ?
C60 C59 H59A 112.3 . . ?
C58 C59 H59A 112.4 . . ?
C60 C59 H59B 111.6 . . ?
C58 C59 H59B 111.5 . . ?
H59A C59 H59B 109.6 . . ?
C59 C60 H60A 109.4 . . ?
C59 C60 H60B 109.2 . . ?
H60A C60 H60B 109.5 . . ?
C59 C60 H60C 109.8 . . ?
H60A C60 H60C 109.5 . . ?
H60B C60 H60C 109.5 . . ?
N5 C61 C62 101(3) . . ?
N5 C61 H61A 111.5 . . ?
C62 C61 H61A 111.6 . . ?
N5 C61 H61B 111.5 . . ?
C62 C61 H61B 111.5 . . ?
H61A C61 H61B 109.4 . . ?
C61 C62 C63 141(4) . . ?
C61 C62 H62A 101.9 . . ?
C63 C62 H62A 101.9 . . ?
C61 C62 H62B 101.8 . . ?
C63 C62 H62B 101.8 . . ?
H62A C62 H62B 104.7 . . ?
C64 C63 C62 106(3) . . ?
```

```
C64 C63 H63A 110.5 . . ?
C62 C63 H63A 110.6 . . ?
C64 C63 H63B 110.6 . . ?
C62 C63 H63B 110.6 . . ?
H63A C63 H63B 108.7 . . ?
C63 C64 H64A 109.5 . . ?
C63 C64 H64B 109.5 . . ?
H64A C64 H64B 109.5 . . ?
C63 C64 H64C 109.4 . . ?
H64A C64 H64C 109.5 . . ?
H64B C64 H64C 109.5 . . ?
C66 C65 N5 138(5) . . ?
C66 C65 H65A 102.6 . . ?
N5 C65 H65A 102.6 . . ?
C66 C65 H65B 102.5 . . ?
N5 C65 H65B 102.6 . . ?
H65A C65 H65B 104.9 . . ?
C67 C66 C65 111(5) . . ?
C67 C66 H66A 109.5 . . ?
C65 C66 H66A 109.5 . . ?
C67 C66 H66B 109.3 . . ?
C65 C66 H66B 109.3 . . ?
H66A C66 H66B 108.0 . . ?
C66 C67 C68 102(3) . . ?
C66 C67 H67A 111.4 . . ?
C68 C67 H67A 111.4 . . ?
C66 C67 H67B 111.2 . . ?
C68 C67 H67B 111.2 . . ?
H67A C67 H67B 109.2 . . ?
C67 C68 H68A 109.4 . . ?
C67 C68 H68B 109.6 . . ?
H68A C68 H68B 109.5 . . ?
C67 C68 H68C 109.4 . . ?
H68A C68 H68C 109.5 . . ?
H68B C68 H68C 109.5 . . ?
N6 C69 C70 83(2) . . ?
N6 C69 H69A 114.8 . . ?
C70 C69 H69A 114.8 . . ?
N6 C69 H69B 114.9 . . ?
C70 C69 H69B 114.9 . . ?
H69A C69 H69B 111.9 . . ?
C71 C70 C69 94(3) . . ?
C71 C70 H70A 113.0 . . ?
C69 C70 H70A 113.0 . . ?
C71 C70 H70B 112.9 . . ?
C69 C70 H70B 112.9 . . ?
H70A C70 H70B 110.3 . . ?
C70 C71 C72 130(4) . . ?
C70 C71 H71A 104.9 . . ?
C72 C71 H71A 104.9 . . ?
C70 C71 H71B 104.9 . . ?
C72 C71 H71B 104.8 . . ?
H71A C71 H71B 105.8 . . ?
C71 C72 H72A 109.5 . . ?
C71 C72 H72B 109.5 . . ?
H72A C72 H72B 109.5 . . ?
C71 C72 H72C 109.4 . . ?
H72A C72 H72C 109.5 . . ?
H72B C72 H72C 109.5 . . ?
C74 C73 N6 136(4) . . ?
C74 C73 H73A 103.1 . . ?
N6 C73 H73A 103.1 . . ?
C74 C73 H73B 103.0 . . ?
N6 C73 H73B 103.0 . . ?
H73A C73 H73B 105.1 . . ?
C73 C74 C75 134(4) . . ?
```

```
C73 C74 H74A 103.6 . . ?
C75 C74 H74A 103.6 . . ?
C73 C74 H74B 103.8 . . ?
C75 C74 H74B 103.8 . . ?
H74A C74 H74B 105.4 . . ?
C76 C75 C74 123(4) . . ?
C76 C75 H75A 106.6 . . ?
C74 C75 H75A 106.7 . . ?
C76 C75 H75B 106.5 . . ?
C74 C75 H75B 106.4 . . ?
H75A C75 H75B 106.5 . . ?
C75 C76 H76A 109.5 . . ?
C75 C76 H76B 109.4 . . ?
H76A C76 H76B 109.5 . . ?
C75 C76 H76C 109.5 . . ?
H76A C76 H76C 109.5 . . ?
H76B C76 H76C 109.5 . . ?
C78 C77 N7 124(3) . . ?
C78 C77 H77A 106.3 . . ?
N7 C77 H77A 106.4 . . ?
C78 C77 H77B 106.3 . . ?
N7 C77 H77B 106.4 . . ?
H77A C77 H77B 106.4 . . ?
C77 C78 C79 117(3) . . ?
C77 C78 H78A 108.0 . . ?
C79 C78 H78A 108.0 . . ?
C77 C78 H78B 108.0 . . ?
C79 C78 H78B 108.0 . . ?
H78A C78 H78B 107.3 . . ?
C80 C79 C78 121(4) . . ?
C80 C79 H79A 107.1 . . ?
C78 C79 H79A 106.9 . . ?
C80 C79 H79B 107.0 . . ?
C78 C79 H79B 107.0 . . ?
H79A C79 H79B 106.7 . . ?
C79 C80 H80A 109.4 . . ?
C79 C80 H80B 109.5 . . ?
H80A C80 H80B 109.5 . . ?
C79 C80 H80C 109.5 . . ?
H80A C80 H80C 109.5 . . ?
H80B C80 H80C 109.5 . . ?
C82 C81 N7 118(3) . . ?
C82 C81 H81A 107.8 . . ?
N7 C81 H81A 107.8 . . ?
C82 C81 H81B 107.8 . . ?
N7 C81 H81B 107.8 . . ?
H81A C81 H81B 107.1 . . ?
C81 C82 C83 117(3) . . ?
C81 C82 H82A 108.1 . . ?
C83 C82 H82A 108.1 . . ?
C81 C82 H82B 108.2 . . ?
C83 C82 H82B 108.2 . . ?
H82A C82 H82B 107.3 . . ?
C84 C83 C82 122(3) . . ?
C84 C83 H83A 106.9 . . ?
C82 C83 H83A 107.0 . . ?
C84 C83 H83B 107.0 . . ?
C82 C83 H83B 106.9 . . ?
H83A C83 H83B 106.7 . . ?
C83 C84 H84A 109.4 . . ?
C83 C84 H84B 109.6 . . ?
H84A C84 H84B 109.5 . . ?
C83 C84 H84C 109.5 . . ?
H84A C84 H84C 109.5 . . ?
H84B C84 H84C 109.5 . . ?
C86 C85 N8 114(2) . . ?
```

```
C86 C85 H85A 108.7 . . ?
N8 C85 H85A 108.7 . . ?
C86 C85 H85B 108.7 . . ?
N8 C85 H85B 108.7 . . ?
H85A C85 H85B 107.6 . . ?
C87 C86 C91 119(2) . . ?
C87 C86 C85 123(2) . . ?
C91 C86 C85 118(2) . . ?
C86 C87 C88 121(3) . . ?
C86 C87 H87 119.5 . . ?
C88 C87 H87 119.5 . . ?
C89 C88 C87 114(3) . . ?
C89 C88 H88 123.2 . . ?
C87 C88 H88 123.2 . . ?
C90 C89 C88 129(4) . . ?
C90 C89 H89 115.7 . . ?
C88 C89 H89 115.7 . . ?
C89 C90 C91 120(3) . . ?
C89 C90 H90 120.2 . . ?
C91 C90 H90 120.2 . . ?
C90 C91 C86 119(3) . . ?
C90 C91 H91 120.7 . . ?
C86 C91 H91 120.7 . . ?
N9 C92 C93 114.9(18) . . ?
N9 C92 H92A 108.6 . . ?
C93 C92 H92A 108.6 . . ?
N9 C92 H92B 108.5 . . ?
C93 C92 H92B 108.6 . . ?
H92A C92 H92B 107.5 . . ?
C94 C93 C98 118(2) . . ?
C94 C93 C92 121(2) . . ?
C98 C93 C92 121(2) . . ?
C95 C94 C93 119(3) . . ?
C95 C94 H94 120.5 . . ?
C93 C94 H94 120.5 . . ?
C96 C95 C94 123(3) . . ?
C96 C95 H95 118.6 . . ?
C94 C95 H95 118.6 . . ?
C95 C96 C97 118(3) . . ?
C95 C96 H96 121.0 . . ?
C97 C96 H96 121.0 . . ?
C98 C97 C96 124(3) . . ?
C98 C97 H97 117.9 . . ?
C96 C97 H97 117.9 . . ?
C97 C98 C93 118(2) . . ?
C97 C98 H98 121.0 . . ?
C93 C98 H98 121.0 . . ?
C100 C99 N10 112.4(17) . . ?
C100 C99 H99A 109.2 . . ?
N10 C99 H99A 109.2 . . ?
C100 C99 H99B 109.1 . . ?
N10 C99 H99B 109.1 . . ?
H99A C99 H99B 107.9 . . ?
C105 C100 C101 118(2) . . ?
C105 C100 C99 122(2) . . ?
C101 C100 C99 120(2) . . ?
C102 C101 C100 124(2) . . ?
C102 C101 H101 118.2 . . ?
C100 C101 H101 118.1 . . ?
C103 C102 C101 119(3) . . ?
C103 C102 H102 120.6 . . ?
C101 C102 H102 120.6 . . ?
C102 C103 C104 121(3) . . ?
C102 C103 H103 119.4 . . ?
C104 C103 H103 119.4 . . ?
C103 C104 C105 120(3) . . ?
```

```
C103 C104 H104 119.8 . . ?
C105 C104 H104 119.8 . . ?
C100 C105 C104 118(2) . . ?
C100 C105 H105 120.9 . . ?
C104 C105 H105 121.0 . . ?
N11 C106 C107 73(2) . . ?
N11 C106 H10A 116.2 . . ?
C107 C106 H10A 116.2 . . ?
N11 C106 H10B 116.2 . . ?
C107 C106 H10B 116.2 . . ?
H10A C106 H10B 113.2 . . ?
C108 C107 C112 119(3) . . ?
C108 C107 C106 114(2) . . ?
C112 C107 C106 123(3) . . ?
C109 C108 C107 121(3) . . ?
C109 C108 H108 119.3 . . ?
C107 C108 H108 119.3 . . ?
C110 C109 C108 118(3) . . ?
C110 C109 H109 121.0 . . ?
C108 C109 H109 120.9 . . ?
C111 C110 C109 125(3) . . ?
C111 C110 H110 117.5 . . ?
C109 C110 H110 117.6 . . ?
C110 C111 C112 117(4) . . ?
C110 C111 H111 121.3 . . ?
C112 C111 H111 121.3 . . ?
C107 C112 C111 120(3) . . ?
C107 C112 H112 120.2 . . ?
C111 C112 H112 120.2 . . ?
N12 C113 C114 100(3) . . ?
N12 C113 H11C 111.7 . . ?
C114 C113 H11C 111.7 . . ?
N12 C113 H11D 111.7 . . ?
C114 C113 H11D 111.7 . . ?
H11C C113 H11D 109.5 . . ?
C119 C114 C115 112(4) . . ?
C119 C114 C113 128(4) . . ?
C115 C114 C113 119(4) . . ?
C116 C115 C114 122(5) . . ?
C116 C115 H115 119.0 . . ?
C114 C115 H115 119.0 . . ?
C115 C116 C117 123(6) . . ?
C115 C116 H116 118.6 . . ?
C117 C116 H116 118.6 . . ?
C118 C117 C116 119(5) . . ?
C118 C117 H117 120.7 . . ?
C116 C117 H117 120.6 . . ?
C119 C118 C117 109(4) . . ?
C119 C118 H118 125.5 . . ?
C117 C118 H118 125.3 . . ?
C114 C119 C118 133(4) . . ?
C114 C119 H119 113.7 . . ?
C118 C119 H119 113.7 . . ?
C29 N3 C25 113(2) . . ?
C29 N3 C21 105(2) . . ?
C25 N3 C21 116(2) . . ?
C29 N3 C33 111(2) . . ?
C25 N3 C33 104(2) . . ?
C21 N3 C33 108(2) . . ?
C41 N4 C45 107(5) . . ?
C41 N4 C49 100(4) . . ?
C45 N4 C49 114(4) . . ?
C41 N4 C37 128(6) . . ?
C45 N4 C37 110(5) . . ?
C49 N4 C37 98(5) . . ?
C61 N5 C57 104(3) . . ?
```

```
C61 N5 C53 93(3) . . ?
C57 N5 C53 114(3) . . ?
C61 N5 C65 137(3) . . ?
C57 N5 C65 100(3) . . ?
C53 N5 C65 110(3) . . ?
C69 N6 C69 139(5) . 2_656 ?
C69 N6 C73 114(3) . 2_656 ?
C69 N6 C73 91(2) 2_656 2_656 ?
C69 N6 C73 91(2) . . ?
C69 N6 C73 114(3) 2_656 . ?
C73 N6 C73 104(4) 2_656 . ?
C81 N7 C81 115(3) . 2_556 ?
C81 N7 C77 111(2) . 2_556 ?
C81 N7 C77 102.6(19) 2_556 2_556 ?
C81 N7 C77 102.6(19) . . ?
C81 N7 C77 111(2) 2_556 . ?
C77 N7 C77 114(3) 2_556 . ?
P1 O1 W1 130.1(7) . . ?
W2 O3 W1 116.5(6) . . ?
P1 O5 W2 128.6(7) . . ?
W2 O6 W3 140.4(7) . . ?
W3 O8 W4 148.7(7) . . ?
W4 O9 Mg1 137.7(7) . . ?
W4 O11 W5 117.9(6) . . ?
W5 O13 Mg1 140.1(7) . . ?
W6 O14 W5 146.7(7) . . ?
W1 O16 W6 139.2(6) . . ?
Si1 O17 W1 127.2(7) . . ?
Si1 O17 W2 126.1(7) . . ?
W1 O17 W2 94.3(4) . . ?
Si1 O18 W4 127.5(7) . . ?
Si1 O18 W5 126.7(7) . . ?
W4 O18 W5 91.9(4) . . ?
Si1 O19 W7 125.8(7) . . ?
Si1 O19 W9 122.7(6) . . ?
W7 O19 W9 92.8(4) . . ?
Si1 O19 W6 124.9(6) . . ?
W7 O19 W6 90.4(4) . . ?
W9 O19 W6 90.0(5) . . ?
Si1 O20 W10 123.8(7) . . ?
Si1 O20 W3 125.9(6) . . ?
W10 O20 W3 91.0(4) . . ?
Si1 O20 W8 123.9(6) . . ?
W10 O20 W8 92.7(4) . . ?
W3 O20 W8 89.4(4) . . ?
W1 O21 W7 144.5(7) . . ?
W2 O22 W8 142.8(7) . . ?
W8 O23 W3 119.4(7) . . ?
W3 O24 W10 118.9(7) . . ?
W10 O25 W4 144.8(7) . . ?
W9 O26 W5 143.8(7) . . ?
W6 O27 W9 117.0(7) . . ?
W7 O28 W6 119.4(6) . . ?
W7 O30 W8 162.1(7) . . ?
W8 O32 W10 120.5(6) . . ?
W10 O34 W9 149.8(6) . . ?
W7 O36 W9 121.9(6) . . ?
W11 O39 Mg1 137.8(7) . . ?
W12 O40 Mg1 136.5(7) . . ?
W11 O42 W12 116.4(6) . . ?
W13 O44 W12 146.4(7) . . ?
W14 O46 W13 141.2(7) . . ?
W14 O48 W15 116.1(6) . . ?
W16 O50 W15 140.1(6) . . ?
W16 O51 W11 147.1(7) . . ?
Si2 O52 W11 130.0(7) . . ?
```

```
Si2 O52 W12 128.4(7) . . ?
W11 O52 W12 94.4(4) . . ?
Si2 O53 W15 129.1(7) . . ?
Si2 O53 W14 128.0(7) . . ?
W15 O53 W14 94.9(4) . . ?
Si2 O54 W17 122.0(7) . . ?
Si2 O54 W20 125.3(7) . . ?
W17 O54 W20 92.8(4) . . ?
Si2 O54 W16 128.5(6) . . ?
W17 O54 W16 89.0(4) . . ?
W20 O54 W16 88.4(4) . . ?
Si2 O55 W18 121.2(6) . . ?
Si2 O55 W19 123.8(6) . . ?
W18 O55 W19 95.0(4) . . ?
Si2 O55 W13 126.1(6) . . ?
W18 O55 W13 90.9(4) . . ?
W19 O55 W13 90.6(4) . . ?
W17 O56 W11 144.7(7) . . ?
W18 O57 W12 145.5(7) . . ?
W13 O58 W18 118.6(7) . . ?
W19 O59 W13 118.6(6) . . ?
W14 O60 W19 141.1(7) . . ?
W15 O61 W20 142.3(7) . . ?
W16 O62 W20 116.6(7) . . ?
W16 O63 W17 118.5(7) . . ?
W18 O65 W17 151.7(7) . . ?
W19 O67 W18 119.2(6) . . ?
W19 O69 W20 163.8(7) . . ?
W20 O71 W17 119.2(6) . . ?
P2 O72 W15 129.2(8) . . ?
P2 O73 W14 130.0(7) . . ?
P2 O74 Mg1 169.3(9) . . ?
C6 O77 O78 52(5) . . ?
C6 O78 O77 39(4) . . ?
O19 Si1 O17 107.2(7) . . ?
O19 Si1 O18 110.6(7) . . ?
O17 Si1 O18 112.0(6) . . ?
O19 Si1 O20 110.2(7) . . ?
O17 Si1 O20 108.3(7) . . ?
O18 Si1 O20 108.5(7) . . ?
O53 Si2 O54 105.6(7) . . ?
O53 Si2 O52 115.6(6) . . ?
O54 Si2 O52 107.5(7) . . ?
O53 Si2 O55 106.9(7) . . ?
O54 Si2 O55 112.4(7) . . ?
O52 Si2 O55 108.9(7) . . ?
O37 P1 O5 107.9(7) . . ?
O37 P1 O1 110.7(7) . . ?
O5 P1 O1 111.7(7) . . ?
O37 P1 C1 112.0(10) . . ?
O5 P1 C1 105.7(10) . . ?
O1 P1 C1 108.8(10) . . ?
O74 P2 O72 113.3(8) . . ?
O74 P2 O73 112.0(8) . . ?
O72 P2 O73 111.5(7) . . ?
O74 P2 C4 109.1(9) . . ?
O72 P2 C4 104.6(9) . . ?
O73 P2 C4 105.8(9) . . ?
O2 W1 O21 100.5(5) . . ?
O2 W1 O16 101.5(6) . . ?
O21 W1 O16 91.4(5) . . ?
O2 W1 O3 99.2(6) . . ?
O21 W1 O3 93.4(5) . . ?
O16 W1 O3 157.5(5) . . ?
O2 W1 O1 94.8(5) . . ?
O21 W1 O1 164.6(5) . . ?
```

```
O16 W1 O1 86.0(5) . . ?
O3 W1 O1 83.5(5) . . ?
O2 W1 O17 171.3(5) . . ?
O21 W1 O17 86.1(5) . . ?
O16 W1 O17 83.9(5) . . ?
O3 W1 O17 74.6(5) . . ?
O1 W1 O17 78.6(5) . . ?
O4 W2 O22 102.3(6) . . ?
O4 W2 O6 103.0(6) . . ?
O22 W2 O6 92.2(5) . . ?
O4 W2 O3 96.3(6) . . ?
O22 W2 O3 93.5(5) . . ?
O6 W2 O3 158.2(5) . . ?
O4 W2 O5 93.5(6) . . ?
O22 W2 O5 164.2(5) . . ?
O6 W2 O5 84.6(5) . . ?
O3 W2 O5 84.3(5) . . ?
O4 W2 O17 167.7(6) . . ?
O22 W2 O17 86.7(5) . . ?
O6 W2 O17 84.8(5) . . ?
O3 W2 O17 74.6(5) . . ?
O5 W2 O17 77.6(5) . . ?
O7 W3 O8 101.9(6) . . ?
O7 W3 O24 101.8(6) . . ?
O8 W3 O24 89.2(6) . . ?
O7 W3 O23 101.8(6) . . ?
O8 W3 O23 156.2(6) . . ?
O24 W3 O23 83.4(5) . . ?
O7 W3 O6 102.0(6) . . ?
O8 W3 O6 91.4(5) . . ?
O24 W3 O6 155.6(6) . . ?
O23 W3 O6 86.3(5) . . ?
O7 W3 O20 176.0(5) . . ?
O8 W3 O20 80.4(5) . . ?
O24 W3 O20 74.9(5) . . ?
O23 W3 O20 75.8(5) . . ?
O6 W3 O20 81.1(5) . . ?
O10 W4 O9 101.5(6) . . ?
O10 W4 O11 97.8(6) . . ?
O9 W4 O11 96.9(5) . . ?
O10 W4 O8 101.7(6) . . ?
O9 W4 O8 92.3(5) . . ?
O11 W4 O8 156.3(5) . . ?
O10 W4 O25 92.3(6) . . ?
O9 W4 O25 166.1(5) . . ?
O11 W4 O25 82.6(5) . . ?
O8 W4 O25 83.4(5) . . ?
O10 W4 O18 170.5(6) . . ?
O9 W4 O18 85.6(5) . . ?
O11 W4 O18 74.8(5) . . ?
O8 W4 O18 84.2(5) . . ?
O25 W4 O18 80.9(4) . . ?
O12 W5 O13 100.9(6) . . ?
O12 W5 O11 99.3(6) . . ?
O13 W5 O11 94.1(5) . . ?
O12 W5 O14 102.4(6) . . ?
O13 W5 O14 93.2(5) . . ?
O11 W5 O14 155.3(5) . . ?
O12 W5 O26 92.2(5) . . ?
O13 W5 O26 166.8(5) . . ?
O11 W5 O26 82.2(5) . . ?
O14 W5 O26 85.3(5) . . ?
O12 W5 O18 169.8(5) . . ?
O13 W5 O18 86.7(5) . . ?
O11 W5 O18 73.2(5) . . ?
O14 W5 O18 83.8(5) . . ?
```

```
O26 W5 O18 80.1(4) . . ?
O15 W6 O27 98.9(6) . . ?
O15 W6 O14 100.3(6) . . ?
O27 W6 O14 88.9(5) . . ?
O15 W6 O28 102.0(6) . . ?
O27 W6 O28 84.4(5) . . ?
O14 W6 O28 157.5(6) . . ?
O15 W6 O16 103.2(6) . . ?
O27 W6 O16 157.5(5) . . ?
O14 W6 O16 91.2(5) . . ?
O28 W6 O16 86.9(5) . . ?
O15 W6 O19 174.8(5) . . ?
O27 W6 O19 76.8(5) . . ?
O14 W6 O19 82.7(5) . . ?
O28 W6 O19 74.8(5) . . ?
O16 W6 O19 80.9(5) . . ?
O29 W7 O36 103.5(6) . . ?
O29 W7 O30 99.5(6) . . ?
O36 W7 O30 93.7(6) . . ?
O29 W7 O28 100.7(6) . . ?
O36 W7 O28 91.9(6) . . ?
O30 W7 O28 157.1(5) . . ?
O29 W7 O21 100.1(6) . . ?
O36 W7 O21 155.8(5) . . ?
O30 W7 O21 87.6(5) . . ?
O28 W7 O21 78.3(5) . . ?
O29 W7 O19 175.4(6) . . ?
O36 W7 O19 74.4(5) . . ?
O30 W7 O19 84.8(5) . . ?
O28 W7 O19 75.4(5) . . ?
O21 W7 O19 81.6(4) . . ?
O31 W8 O32 100.7(6) . . ?
O31 W8 O23 101.1(6) . . ?
O32 W8 O23 90.4(6) . . ?
O31 W8 O30 100.1(6) . . ?
O32 W8 O30 94.6(6) . . ?
O23 W8 O30 156.8(5) . . ?
O31 W8 O22 102.3(6) . . ?
O32 W8 O22 156.4(5) . . ?
O23 W8 O22 80.5(5) . . ?
O30 W8 O22 86.0(5) . . ?
O31 W8 O20 173.6(6) . . ?
O32 W8 O20 74.1(5) . . ?
O23 W8 O20 75.4(5) . . ?
O30 W8 O20 84.2(5) . . ?
O22 W8 O20 82.6(4) . . ?
O35 W9 O26 103.5(6) . . ?
O35 W9 O34 101.7(6) . . ?
O26 W9 O34 92.7(5) . . ?
O35 W9 O27 98.0(6) . . ?
O26 W9 O27 89.3(5) . . ?
O34 W9 O27 159.1(5) . . ?
O35 W9 O36 101.9(6) . . ?
O26 W9 O36 154.4(5) . . ?
O34 W9 O36 85.2(5) . . ?
O27 W9 O36 84.0(5) . . ?
O35 W9 O19 170.0(6) . . ?
O26 W9 O19 84.1(5) . . ?
O34 W9 O19 84.2(5) . . ?
O27 W9 O19 75.3(5) . . ?
O36 W9 O19 70.3(5) . . ?
O33 W10 O25 103.5(6) . . ?
O33 W10 O34 100.0(6) . . ?
O25 W10 O34 93.8(5) . . ?
O33 W10 O24 99.6(6) . . ?
O25 W10 O24 88.6(5) . . ?
```

```
O34 W10 O24 159.1(5) . . ?
O33 W10 O32 101.0(6) . . ?
O25 W10 O32 155.1(5) . . ?
O34 W10 O32 86.6(5) . . ?
O24 W10 O32 82.6(5) . . ?
O33 W10 O20 171.5(6) . . ?
O25 W10 O20 82.8(5) . . ?
O34 W10 O20 85.2(5) . . ?
O24 W10 O20 74.5(5) . . ?
O32 W10 O20 72.4(5) . . ?
O41 W11 O39 101.4(6) . . ?
O41 W11 O42 97.4(6) . . ?
O39 W11 O42 95.5(5) . . ?
O41 W11 O51 100.4(6) . . ?
O39 W11 O51 92.0(5) . . ?
O42 W11 O51 159.0(5) . . ?
O41 W11 O56 92.8(5) . . ?
O39 W11 O56 165.6(5) . . ?
O42 W11 O56 84.9(5) . . ?
O51 W11 O56 83.2(5) . . ?
O41 W11 O52 168.5(5) . . ?
O39 W11 O52 86.5(5) . . ?
O42 W11 O52 73.4(5) . . ?
O51 W11 O52 87.5(5) . . ?
O56 W11 O52 79.8(4) . . ?
O43 W12 O40 100.8(6) . . ?
O43 W12 O42 97.4(6) . . ?
O40 W12 O42 96.0(6) . . ?
O43 W12 O44 99.6(6) . . ?
O40 W12 O44 92.3(5) . . ?
O42 W12 O44 159.3(5) . . ?
O43 W12 O57 91.9(6) . . ?
O40 W12 O57 167.0(5) . . ?
O42 W12 O57 85.1(5) . . ?
O44 W12 O57 82.7(5) . . ?
O43 W12 O52 167.8(6) . . ?
O40 W12 O52 87.6(5) . . ?
O42 W12 O52 72.8(5) . . ?
O44 W12 O52 88.7(5) . . ?
O57 W12 O52 80.3(5) . . ?
O45 W13 O58 102.8(6) . . ?
O45 W13 O44 101.2(6) . . ?
O58 W13 O44 88.5(5) . . ?
O45 W13 O46 101.3(6) . . ?
O58 W13 O46 155.6(5) . . ?
O44 W13 O46 90.7(5) . . ?
O45 W13 O59 101.6(6) . . ?
O58 W13 O59 85.0(5) . . ?
O44 W13 O59 157.1(5) . . ?
O46 W13 O59 86.3(5) . . ?
O45 W13 O55 175.2(5) . . ?
O58 W13 O55 74.6(5) . . ?
O44 W13 O55 82.8(5) . . ?
O46 W13 O55 81.1(5) . . ?
O59 W13 O55 74.3(5) . . ?
O47 W14 O60 101.0(6) . . ?
O47 W14 O46 101.9(6) . . ?
O60 W14 O46 91.3(6) . . ?
O47 W14 O48 96.2(6) . . ?
O60 W14 O48 95.6(6) . . ?
O46 W14 O48 159.0(5) . . ?
O47 W14 O73 95.6(5) . . ?
O60 W14 O73 163.2(5) . . ?
O46 W14 O73 82.8(5) . . ?
O48 W14 O73 85.0(5) . . ?
O47 W14 O53 168.9(6) . . ?
```

```
O60 W14 O53 86.0(5) . . ?
O46 W14 O53 86.4(5) . . ?
O48 W14 O53 74.4(5) . . ?
O73 W14 O53 77.9(4) . . ?
O49 W15 O61 102.9(6) . . ?
O49 W15 O50 100.7(6) . . ?
O61 W15 O50 90.9(5) . . ?
O49 W15 O48 95.7(6) . . ?
O61 W15 O48 95.8(5) . . ?
O50 W15 O48 160.4(5) . . ?
O49 W15 O72 93.6(6) . . ?
O61 W15 O72 163.4(6) . . ?
O50 W15 O72 84.3(5) . . ?
O48 W15 O72 84.1(5) . . ?
O49 W15 O53 167.7(6) . . ?
O61 W15 O53 85.8(5) . . ?
O50 W15 O53 87.6(5) . . ?
O48 W15 O53 74.6(5) . . ?
O72 W15 O53 78.1(5) . . ?
O091 W16 O51 101.1(6) . . ?
O091 W16 O63 102.6(7) . . ?
O51 W16 O63 88.4(5) . . ?
O091 W16 O62 99.9(6) . . ?
O51 W16 O62 159.0(6) . . ?
O63 W16 O62 86.1(6) . . ?
O091 W16 O50 100.7(6) . . ?
O51 W16 O50 90.7(5) . . ?
O63 W16 O50 156.4(5) . . ?
O62 W16 O50 86.3(5) . . ?
O091 W16 O54 177.1(5) . . ?
O51 W16 O54 81.4(5) . . ?
O63 W16 O54 75.9(5) . . ?
O62 W16 O54 77.6(5) . . ?
O50 W16 O54 80.7(5) . . ?
O64 W17 O56 105.1(6) . . ?
O64 W17 O65 100.0(7) . . ?
O56 W17 O65 94.3(5) . . ?
O64 W17 O63 99.6(7) . . ?
O56 W17 O63 87.1(5) . . ?
O65 W17 O63 159.2(5) . . ?
O64 W17 O71 99.4(6) . . ?
O56 W17 O71 155.0(5) . . ?
O65 W17 O71 86.3(5) . . ?
O63 W17 O71 83.8(5) . . ?
O64 W17 O54 170.3(6) . . ?
O56 W17 O54 83.6(5) . . ?
O65 W17 O54 83.5(5) . . ?
O63 W17 O54 76.0(5) . . ?
O71 W17 O54 71.6(4) . . ?
O66 W18 O57 105.1(6) . . ?
O66 W18 O65 101.7(7) . . ?
O57 W18 O65 96.6(5) . . ?
O66 W18 O58 97.9(7) . . ?
O57 W18 O58 86.5(5) . . ?
O65 W18 O58 158.6(6) . . ?
O66 W18 O67 98.5(5) . . ?
O57 W18 O67 155.3(5) . . ?
O65 W18 O67 85.5(5) . . ?
O58 W18 O67 83.1(5) . . ?
O66 W18 O55 167.7(5) . . ?
O57 W18 O55 84.6(5) . . ?
O65 W18 O55 84.3(5) . . ?
O58 W18 O55 74.9(5) . . ?
O67 W18 O55 71.0(4) . . ?
O68 W19 O67 102.2(6) . . ?
O68 W19 O59 99.3(6) . . ?
```

```
O67 W19 O59 91.8(6) . . ?
O68 W19 O69 99.5(6) . . ?
O67 W19 O69 97.5(6) . . ?
O59 W19 O69 156.6(5) . . ?
O68 W19 O60 99.6(6) . . ?
O67 W19 O60 157.1(5) . . ?
O59 W19 O60 77.9(6) . . ?
O69 W19 O60 85.5(6) . . ?
O68 W19 O55 174.4(6) . . ?
O67 W19 O55 74.5(5) . . ?
O59 W19 O55 76.4(5) . . ?
O69 W19 O55 85.5(5) . . ?
O60 W19 O55 83.2(4) . . ?
O70 W20 O71 101.4(6) . . ?
O70 W20 O69 99.2(6) . . ?
O71 W20 O69 95.4(6) . . ?
O70 W20 O62 100.4(6) . . ?
O71 W20 O62 92.7(6) . . ?
O69 W20 O62 156.8(5) . . ?
O70 W20 O61 101.0(6) . . ?
O71 W20 O61 157.1(5) . . ?
O69 W20 O61 85.5(5) . . ?
O62 W20 O61 78.8(5) . . ?
O70 W20 O54 176.3(6) . . ?
O71 W20 O54 75.8(5) . . ?
O69 W20 O54 83.6(5) . . ?
O62 W20 O54 77.4(5) . . ?
O61 W20 O54 81.6(4) . . ?
O74 Mg1 O13 90.4(6) . . ?
O74 Mg1 O39 103.2(5) . . ?
O13 Mg1 O39 89.8(5) . . ?
O74 Mg1 O40 101.8(6) . . ?
O13 Mg1 O40 167.7(6) . . ?
O39 Mg1 O40 88.7(5) . . ?
O74 Mg1 O9 90.5(5) . . ?
O13 Mg1 O9 91.6(5) . . ?
O39 Mg1 O9 166.3(5) . . ?
O40 Mg1 O9 87.0(5) . . ?
O74 Mg1 O38 170.0(6) . . ?
O13 Mg1 O38 81.0(5) . . ?
O39 Mg1 O38 82.2(5) . . ?
O40 Mg1 O38 86.7(5) . . ?
O9 Mg1 O38 84.5(5) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
P1 C1 C2 C3 167(3) . . . . ?
C1 C2 C3 O76 31(8) . . . . ?
C1 C2 C3 O75 -100(6) . . . . ?
P2 C4 C5 C6 -173(3) . . . . ?
C4 C5 C6 O77 -62(8) . . . . ?
C4 C5 C6 O78 -154(6) . . . . ?
C13 C8 C9 C10 0.0 . . . . ?
C13 C8 C9 C7 -145(8) . . . . ?
N2 C7 C9 C8 24(10) . . . . ?
N2 C7 C9 C10 -126(6) . . . . ?
C8 C9 C10 C11 0.0 . . . . ?
```

```
C7 C9 C10 C11 153(6) . . . . ?
C9 C10 C11 C12 0.0 . . . . ?
C10 C11 C12 C13 0.0 . . . . ?
C11 C12 C13 C8 0.0 . . . . ?
C9 C8 C13 C12 0.0 . . . . ?
C20 C15 C16 C17 0.0 . . . . ?
C20 C15 C16 C14 147(7) . . . . ?
N1 C14 C16 C15 -19(13) . . . . ?
N1 C14 C16 C17 132(8) . . . . ?
C15 C16 C17 C18 0.0 . . . . ?
C14 C16 C17 C18 -152(6) . . . . ?
C16 C17 C18 C19 0.0 . . . . ?
C17 C18 C19 C20 0.0 . . . . ?
C18 C19 C20 C15 0.0 . . . . ?
C16 C15 C20 C19 0.0 . . . . ?
N3 C21 C22 C23 -172(2) . . . . ?
C21 C22 C23 C24 -170(3) . . . . ?
N3 C25 C26 C27 -164(3) . . . . ?
C25 C26 C27 C28 -169(4) . . . . ?
N3 C29 C30 C31 -166(3) . . . . ?
C29 C30 C31 C32 169(4) . . . . ?
N3 C33 C34 C35 -160(4) . . . . ?
C33 C34 C35 C36 74(6) . . . . ?
N4 C37 C38 C39 151(7) . . . . ?
C37 C38 C39 C40 142(9) . . . . ?
N4 C41 C42 C43 138(5) . . . . ?
C41 C42 C43 C44 146(6) . . . . ?
N4 C45 C46 C47 -177(5) . . . . ?
C45 C46 C47 C48 170(6) . . . . ?
N4 C49 C50 C51 177(4) . . . . ?
C49 C50 C51 C52 67(7) . . . . ?
N5 C53 C54 C55 -179(4) . . . . ?
C53 C54 C55 C56 48(7) . . . . ?
N5 C57 C58 C59 -161(5) . . . . ?
C57 C58 C59 C60 -164(6) . . . . ?
N5 C61 C62 C63 176(5) . . . . ?
C61 C62 C63 C64 12(9) . . . . ?
N5 C65 C66 C67 -169(5) . . . . ?
C65 C66 C67 C68 32(10) . . . . ?
N6 C69 C70 C71 161(3) . . . . ?
C69 C70 C71 C72 153(5) . . . . ?
N6 C73 C74 C75 159(4) . . . . ?
C73 C74 C75 C76 151(5) . . . . ?
N7 C77 C78 C79 -179(3) . . . . ?
C77 C78 C79 C80 -175(4) . . . . ?
N7 C81 C82 C83 172(3) . . . . ?
C81 C82 C83 C84 174(4) . . . . ?
N8 C85 C86 C87 91(3) . . . . ?
N8 C85 C86 C91 -84(3) . . . . ?
C91 C86 C87 C88 0(4) . . . . ?
C85 C86 C87 C88 -176(3) . . . . ?
C86 C87 C88 C89 2(4) . . . . ?
C87 C88 C89 C90 -3(5) . . . . ?
C88 C89 C90 C91 1(5) . . . . ?
C89 C90 C91 C86 1(5) . . . . ?
C87 C86 C91 C90 -2(4) . . . . ?
C85 C86 C91 C90 174(2) . . . . ?
N9 C92 C93 C94 85(3) . . . . ?
N9 C92 C93 C98 -94(3) . . . . ?
C98 C93 C94 C95 -5(4) . . . . ?
C92 C93 C94 C95 176(3) . . . . ?
C93 C94 C95 C96 5(5) . . . . ?
C94 C95 C96 C97 -4(5) . . . . ?
C95 C96 C97 C98 2(5) . . . . ?
C96 C97 C98 C93 -2(4) . . . . ?
C94 C93 C98 C97 3(4) . . . . ?
```

C92 C93 C98 C97 -177(2) . . . . ?
N10 C99 C100 C105 90(2) . . . . ?
N10 C99 C100 C101 -91(2) . . . . ?
C105 C100 C101 C102 3(3) . . . . ?
C99 C100 C101 C102 -176(2) . . . . ?
C100 C101 C102 C103 -5(4) . . . . ?
C101 C102 C103 C104 3(4) . . . . ?
C102 C103 C104 C105 0(4) . . . . ?
C101 C100 C105 C104 0(3) . . . . ?
C99 C100 C105 C104 179(2) . . . . ?
C103 C104 C105 C100 -1(4) . . . . ?
N11 C106 C107 C108 126(3) . . . . ?
N11 C106 C107 C112 -79(3) . . . . ?
C112 C107 C108 C109 -1(4) . . . . ?
C106 C107 C108 C109 155(2) . . . . ?
C107 C108 C109 C110 1(4) . . . . ?
C108 C109 C110 C111 -1(5) . . . . ?
C109 C110 C111 C112 2(5) . . . . ?
C108 C107 C112 C111 2(5) . . . . ?
C106 C107 C112 C111 -151(3) . . . . ?
C110 C111 C112 C107 -3(5) . . . . ?
N12 C113 C114 C119 -111(4) . . . . ?
N12 C113 C114 C115 81(4) . . . . ?
C119 C114 C115 C116 7(7) . . . . ?
C113 C114 C115 C116 177(4) . . . . ?
C114 C115 C116 C117 -9(8) . . . . ?
C115 C116 C117 C118 -3(8) . . . . ?
C116 C117 C118 C119 15(6) . . . . ?
C115 C114 C119 C118 9(7) . . . . ?
C113 C114 C119 C118 -160(4) . . . . ?
C117 C118 C119 C114 -20(7) . . . . ?
C30 C29 N3 C25 63(3) . . . . ?
C30 C29 N3 C21 -170(3) . . . . ?
C30 C29 N3 C33 -53(3) . . . . ?
C26 C25 N3 C29 59(3) . . . . ?
C26 C25 N3 C21 -62(3) . . . . ?
C26 C25 N3 C33 179(2) . . . . ?
C22 C21 N3 C29 -180(3) . . . . ?
C22 C21 N3 C25 -54(3) . . . . ?
C22 C21 N3 C33 62(3) . . . . ?
C34 C33 N3 C29 -46(4) . . . . ?
C34 C33 N3 C25 -168(3) . . . . ?
C34 C33 N3 C21 69(3) . . . . ?
C42 C41 N4 C45 62(6) . . . . ?
C42 C41 N4 C49 180(5) . . . . ?
C42 C41 N4 C37 -71(8) . . . . ?
C46 C45 N4 C41 158(6) . . . . ?
C46 C45 N4 C49 49(7) . . . . ?
C46 C45 N4 C37 -60(7) . . . . ?
C50 C49 N4 C41 -39(7) . . . . ?
C50 C49 N4 C45 74(6) . . . . ?
C50 C49 N4 C37 -170(5) . . . . ?
C38 C37 N4 C41 -6(11) . . . . ?
C38 C37 N4 C45 -137(7) . . . . ?
C38 C37 N4 C49 104(8) . . . . ?
C62 C61 N5 C57 -129(4) . . . . ?
C62 C61 N5 C53 116(4) . . . . ?
C62 C61 N5 C65 -7(7) . . . . ?
C58 C57 N5 C61 -47(8) . . . . ?
C58 C57 N5 C53 52(8) . . . . ?
C58 C57 N5 C65 169(7) . . . . ?
C54 C53 N5 C61 152(4) . . . . ?
C54 C53 N5 C57 46(4) . . . . ?
C54 C53 N5 C65 -66(4) . . . . ?
C66 C65 N5 C61 -38(10) . . . . ?
C66 C65 N5 C57 84(8) . . . . ?

```
C66 C65 N5 C53 -155(8) . . . . ?
C70 C69 N6 C69 -48(2) . . . 2_656 ?
C70 C69 N6 C73 76(3) . . . 2_656 ?
C70 C69 N6 C73 -178(3) . . . . ?
C74 C73 N6 C69 -61(6) . . . . ?
C74 C73 N6 C69 151(5) . . . 2_656 ?
C74 C73 N6 C73 54(5) . . . 2_656 ?
C82 C81 N7 C81 50(3) . . . 2_556 ?
C82 C81 N7 C77 -66(4) . . . 2_556 ?
C82 C81 N7 C77 171(3) . . . . ?
C78 C77 N7 C81 70(4) . . . . ?
C78 C77 N7 C81 -167(3) . . . 2_556 ?
C78 C77 N7 C77 -51(3) . . . 2_556 ?
C5 C6 O77 O78 -100(7) . . . . ?
C5 C6 O78 O77 105(7) . . . . ?
W7 O19 Si1 O17 57.1(9) . . . . ?
W9 O19 Si1 O17 179.5(6) . . . . ?
W6 O19 Si1 O17 -63.9(9) . . . . ?
W7 O19 Si1 O18 179.5(7) . . . . ?
W9 O19 Si1 O18 -58.1(9) . . . . ?
W6 O19 Si1 O18 58.5(9) . . . . ?
W7 O19 Si1 O20 -60.5(10) . . . . ?
W9 O19 Si1 O20 61.8(9) . . . . ?
W6 O19 Si1 O20 178.5(7) . . . . ?
W1 O17 Si1 O19 7.5(10) . . . . ?
W2 O17 Si1 O19 -124.5(8) . . . . ?
W1 O17 Si1 O18 -114.0(8) . . . . ?
W2 O17 Si1 O18 114.0(8) . . . . ?
W1 O17 Si1 O20 126.4(8) . . . . ?
W2 O17 Si1 O20 -5.6(9) . . . . ?
W4 O18 Si1 O19 125.2(8) . . . . ?
W5 O18 Si1 O19 -3.6(10) . . . . ?
W4 O18 Si1 O17 -115.3(8) . . . . ?
W5 O18 Si1 O17 116.0(8) . . . . ?
W4 O18 Si1 O20 4.2(11) . . . . ?
W5 O18 Si1 O20 -124.5(8) . . . . ?
W10 O20 Si1 O19 -61.0(9) . . . . ?
W3 O20 Si1 O19 178.2(7) . . . . ?
W8 O20 Si1 O19 60.2(10) . . . . ?
W10 O20 Si1 O17 -178.0(6) . . . . ?
W3 O20 Si1 O17 61.3(9) . . . . ?
W8 O20 Si1 O17 -56.8(9) . . . . ?
W10 O20 Si1 O18 60.1(9) . . . . ?
W3 O20 Si1 O18 -60.6(10) . . . . ?
W8 O20 Si1 O18 -178.7(7) . . . . ?
W15 O53 Si2 O54 10.0(9) . . . . ?
W14 O53 Si2 O54 -130.6(8) . . . . ?
W15 O53 Si2 O52 -108.7(8) . . . . ?
W14 O53 Si2 O52 110.6(8) . . . . ?
W15 O53 Si2 O55 129.9(7) . . . . ?
W14 O53 Si2 O55 -10.8(9) . . . . ?
W17 O54 Si2 O53 178.2(6) . . . . ?
W20 O54 Si2 O53 57.4(9) . . . . ?
W16 O54 Si2 O53 -63.8(9) . . . . ?
W17 O54 Si2 O52 -57.9(9) . . . . ?
W20 O54 Si2 O52 -178.7(7) . . . . ?
W16 O54 Si2 O52 60.2(10) . . . . ?
W17 O54 Si2 O55 62.0(8) . . . . ?
W20 O54 Si2 O55 -58.8(10) . . . . ?
W16 O54 Si2 O55 -180.0(7) . . . . ?
W11 O52 Si2 O53 108.5(9) . . . . ?
W12 O52 Si2 O53 -108.9(9) . . . . ?
W11 O52 Si2 O54 -9.1(11) . . . . ?
W12 O52 Si2 O54 133.5(8) . . . . ?
W11 O52 Si2 O55 -131.1(8) . . . . ?
W12 O52 Si2 O55 11.5(10) . . . . ?
```

```
W18 O55 Si2 O53 -178.7(6) . . . . ?
W19 O55 Si2 O53 -56.8(9) . . . . ?
W13 O55 Si2 O53 63.6(9) . . . . ?
W18 O55 Si2 O54 -63.3(9) . . . . ?
W19 O55 Si2 O54 58.7(9) . . . . ?
W13 O55 Si2 O54 179.0(7) . . . . ?
W18 O55 Si2 O52 55.7(8) . . . . ?
W19 O55 Si2 O52 177.7(7) . . . . ?
W13 O55 Si2 O52 -62.0(9) . . . . ?
W2 O5 P1 O37 157.3(9) . . . . ?
W2 O5 P1 O1 35.5(12) . . . . ?
W2 O5 P1 C1 -82.7(13) . . . . ?
W1 O1 P1 O37 -153.9(9) . . . . ?
W1 O1 P1 O5 -33.8(12) . . . . ?
W1 O1 P1 C1 82.5(13) . . . . ?
C2 C1 P1 O37 69(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O5 -48(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O1 -168(2) . . . . ?
Mg1 O74 P2 O72 -106(5) . . . . ?
Mg1 O74 P2 O73 127(5) . . . . ?
Mg1 O74 P2 C4 10(5) . . . . ?
W15 O72 P2 O74 -94.7(10) . . . . ?
W15 O72 P2 O73 32.7(12) . . . . ?
W15 O72 P2 C4 146.6(10) . . . . ?
W14 O73 P2 O74 96.4(10) . . . . ?
W14 O73 P2 O72 -31.7(12) . . . . ?
W14 O73 P2 C4 -144.9(10) . . . . ?
C5 C4 P2 O74 174.4(17) . . . . ?
C5 C4 P2 O72 -64.1(19) . . . . ?
C5 C4 P2 O73 53.8(19) . . . . ?
W7 O21 W1 O2 -126.1(12) . . . . ?
W7 O21 W1 O16 -24.2(12) . . . . ?
W7 O21 W1 O3 133.8(12) . . . . ?
W7 O21 W1 O1 56(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O17 59.6(12) . . . . ?
W6 O16 W1 O2 109.5(10) . . . . ?
W6 O16 W1 O21 8.5(10) . . . . ?
W6 O16 W1 O3 -93.9(15) . . . . ?
W6 O16 W1 O1 -156.4(10) . . . . ?
W6 O16 W1 O17 -77.4(9) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 176.0(7) . . . . ?
W2 O3 W1 O21 -82.8(7) . . . . ?
W2 O3 W1 O16 19.2(17) . . . . ?
W2 O3 W1 O1 82.1(7) . . . . ?
W2 O3 W1 O17 2.2(6) . . . . ?
P1 O1 W1 O2 -113.0(10) . . . . ?
P1 O1 W1 O21 65(2) . . . . ?
P1 O1 W1 O16 145.8(10) . . . . ?
P1 O1 W1 O3 -14.2(10) . . . . ?
P1 O1 W1 O17 61.3(10) . . . . ?
Si1 O17 W1 O2 170(3) . . . . ?
W2 O17 W1 O2 -47(3) . . . . ?
Si1 O17 W1 O21 -50.0(8) . . . . ?
W2 O17 W1 O21 93.0(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O16 41.8(8) . . . . ?
W2 O17 W1 O16 -175.2(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O3 -144.6(9) . . . . ?
W2 O17 W1 O3 -1.6(4) . . . . ?
Si1 O17 W1 O1 129.0(8) . . . . ?
W2 O17 W1 O1 -88.0(5) . . . . ?
W8 O22 W2 O4 125.7(11) . . . . ?
W8 O22 W2 O6 21.9(11) . . . . ?
W8 O22 W2 O3 -137.1(11) . . . . ?
W8 O22 W2 O5 -56(3) . . . . ?
W8 O22 W2 O17 -62.8(11) . . . . ?
W3 O6 W2 O4 -113.0(11) . . . . ?
```

```
W3 O6 W2 O22 -9.8(11) . . . . ?
W3 O6 W2 O3 95.2(16) . . . . ?
W3 O6 W2 O5 154.7(11) . . . . ?
W3 O6 W2 O17 76.7(11) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 -173.8(7) . . . . ?
W1 O3 W2 O22 83.5(7) . . . . ?
W1 O3 W2 O6 -21.3(18) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 -80.8(7) . . . . ?
W1 O3 W2 O17 -2.1(6) . . . . ?
P1 O5 W2 O4 107.7(10) . . . . ?
P1 O5 W2 O22 -71(2) . . . . ?
P1 O5 W2 O6 -149.5(10) . . . . ?
P1 O5 W2 O3 11.7(10) . . . . ?
P1 O5 W2 O17 -63.7(10) . . . . ?
Si1 O17 W2 O4 -172(2) . . . . ?
W1 O17 W2 O4 45(3) . . . . ?
Si1 O17 W2 O22 50.7(8) . . . . ?
W1 O17 W2 O22 -92.9(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O6 -41.8(8) . . . . ?
W1 O17 W2 O6 174.7(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O3 145.3(9) . . . . ?
W1 O17 W2 O3 1.7(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O5 -127.3(8) . . . . ?
W1 O17 W2 O5 89.1(5) . . . . ?
W4 O8 W3 O7 -140.6(14) . . . . ?
W4 O8 W3 O24 -38.7(14) . . . . ?
W4 O8 W3 O23 33(2) . . . . ?
W4 O8 W3 O6 116.9(14) . . . . ?
W4 O8 W3 O20 36.1(14) . . . . ?
W10 O24 W3 O7 174.3(7) . . . . ?
W10 O24 W3 O8 72.3(7) . . . . ?
W10 O24 W3 O23 -84.9(7) . . . . ?
W10 O24 W3 O6 -19.2(16) . . . . ?
W10 O24 W3 O20 -7.9(6) . . . . ?
W8 O23 W3 O7 176.5(7) . . . . ?
W8 O23 W3 O8 3.0(18) . . . . ?
W8 O23 W3 O24 75.8(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O6 -82.0(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O20 -0.2(6) . . . . ?
W2 O6 W3 O7 133.9(11) . . . . ?
W2 O6 W3 O8 -123.7(11) . . . . ?
W2 O6 W3 O24 -33(2) . . . . ?
W2 O6 W3 O23 32.6(11) . . . . ?
W2 O6 W3 O20 -43.6(10) . . . . ?
Si1 O20 W3 O7 173(28) . . . . ?
W10 O20 W3 O7 39(8) . . . . ?
W8 O20 W3 O7 -54(8) . . . . ?
Si1 O20 W3 O8 48.5(8) . . . . ?
W10 O20 W3 O8 -85.9(5) . . . . ?
W8 O20 W3 O8 -178.5(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O24 140.3(9) . . . . ?
W10 O20 W3 O24 5.9(4) . . . . ?
W8 O20 W3 O24 -86.8(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O23 -132.8(9) . . . . ?
W10 O20 W3 O23 92.8(5) . . . . ?
W8 O20 W3 O23 0.1(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O6 -44.4(8) . . . . ?
W10 O20 W3 O6 -178.8(5) . . . . ?
W8 O20 W3 O6 88.5(5) . . . . ?
Mg1 O9 W4 O10 -126.0(10) . . . . ?
Mg1 O9 W4 O11 -26.5(11) . . . . ?
Mg1 O9 W4 O8 131.6(10) . . . . ?
Mg1 O9 W4 O25 60(3) . . . . ?
Mg1 O9 W4 O18 47.6(10) . . . . ?
W5 O11 W4 O10 172.9(7) . . . . ?
W5 O11 W4 O9 70.2(7) . . . . ?
```

```
W5 O11 W4 O8 -41.7(15) . . . . ?
W5 O11 W4 O25 -95.8(6) . . . . ?
W5 O11 W4 O18 -13.3(5) . . . . ?
W3 O8 W4 O10 103.9(14) . . . . ?
W3 O8 W4 O9 -153.8(14) . . . . ?
W3 O8 W4 O11 -41(2) . . . . ?
W3 O8 W4 O25 12.9(14) . . . . ?
W3 O8 W4 O18 -68.5(14) . . . . ?
W10 O25 W4 O10 -117.9(12) . . . . ?
W10 O25 W4 O9 56(3) . . . . ?
W10 O25 W4 O11 144.6(12) . . . . ?
W10 O25 W4 O8 -16.3(12) . . . . ?
W10 O25 W4 O18 68.8(12) . . . . ?
Si1 O18 W4 O10 -91(3) . . . . ?
W5 O18 W4 O10 50(3) . . . . ?
Si1 O18 W4 O9 130.1(9) . . . . ?
W5 O18 W4 O9 -88.6(5) . . . . ?
Si1 O18 W4 O11 -131.5(9) . . . . ?
W5 O18 W4 O11 9.8(4) . . . . ?
Si1 O18 W4 O8 37.4(9) . . . . ?
W5 O18 W4 O8 178.7(5) . . . . ?
Si1 O18 W4 O25 -46.8(9) . . . . ?
W5 O18 W4 O25 94.5(5) . . . . ?
Mg1 O13 W5 O12 134.1(11) . . . . ?
Mg1 O13 W5 O11 33.8(11) . . . . ?
Mg1 O13 W5 O14 -122.6(11) . . . . ?
Mg1 O13 W5 O26 -39(3) . . . . ?
Mg1 O13 W5 O18 -39.0(11) . . . . ?
W4 O11 W5 O12 -174.0(6) . . . . ?
W4 O11 W5 O13 -72.2(7) . . . . ?
W4 O11 W5 O14 34.7(15) . . . . ?
W4 O11 W5 O26 95.0(6) . . . . ?
W4 O11 W5 O18 13.1(5) . . . . ?
W6 O14 W5 O12 -104.2(14) . . . . ?
W6 O14 W5 O13 153.9(14) . . . . ?
W6 O14 W5 O11 47(2) . . . . ?
W6 O14 W5 O26 -13.0(13) . . . . ?
W6 O14 W5 O18 67.5(13) . . . . ?
W9 O26 W5 O12 115.6(12) . . . . ?
W9 O26 W5 O13 -71(3) . . . . ?
W9 O26 W5 O11 -145.3(12) . . . . ?
W9 O26 W5 O14 13.4(12) . . . . ?
W9 O26 W5 O18 -71.1(12) . . . . ?
Si1 O18 W5 O12 89(3) . . . . ?
W4 O18 W5 O12 -53(3) . . . . ?
Si1 O18 W5 O13 -132.7(9) . . . . ?
W4 O18 W5 O13 85.6(5) . . . . ?
Si1 O18 W5 O11 132.0(9) . . . . ?
W4 O18 W5 O11 -9.7(4) . . . . ?
Si1 O18 W5 O14 -39.1(8) . . . . ?
W4 O18 W5 O14 179.2(5) . . . . ?
Si1 O18 W5 O26 47.2(8) . . . . ?
W4 O18 W5 O26 -94.5(5) . . . . ?
W9 O27 W6 O15 -174.6(7) . . . . ?
W9 O27 W6 O14 -74.4(7) . . . . ?
W9 O27 W6 O28 84.1(7) . . . . ?
W9 O27 W6 O16 16.2(16) . . . . ?
W9 O27 W6 O19 8.4(6) . . . . ?
W5 O14 W6 O15 139.8(14) . . . . ?
W5 O14 W6 O27 40.9(14) . . . . ?
W5 O14 W6 O28 -32(2) . . . . ?
W5 O14 W6 O16 -116.6(14) . . . . ?
W5 O14 W6 O19 -35.9(13) . . . . ?
W7 O28 W6 O15 -174.0(7) . . . . ?
W7 O28 W6 O27 -76.0(8) . . . . ?
W7 O28 W6 O14 -2.6(19) . . . . ?
```

```
W7 O28 W6 O16 83.2(7) . . . . ?
W7 O28 W6 O19 1.7(6) . . . . ?
W1 O16 W6 O15 -132.6(9) . . . . ?
W1 O16 W6 O27 36.4(18) . . . . ?
W1 O16 W6 O14 126.5(10) . . . . ?
W1 O16 W6 O28 -31.0(10) . . . . ?
W1 O16 W6 O19 44.1(9) . . . . ?
Si1 O19 W6 O15 -172(6) . . . . ?
W7 O19 W6 O15 52(6) . . . . ?
W9 O19 W6 O15 -41(6) . . . . ?
Si1 O19 W6 O27 -137.5(9) . . . . ?
W7 O19 W6 O27 86.5(5) . . . . ?
W9 O19 W6 O27 -6.3(4) . . . . ?
Si1 O19 W6 O14 -46.9(8) . . . . ?
W7 O19 W6 O14 177.1(5) . . . . ?
W9 O19 W6 O14 84.3(5) . . . . ?
Si1 O19 W6 O28 134.7(9) . . . . ?
W7 O19 W6 O28 -1.3(5) . . . . ?
W9 O19 W6 O28 -94.1(5) . . . . ?
Si1 O19 W6 O16 45.5(8) . . . . ?
W7 O19 W6 O16 -90.5(4) . . . . ?
W9 O19 W6 O16 176.7(4) . . . . ?
W9 O36 W7 O29 -169.0(8) . . . . ?
W9 O36 W7 O30 90.3(8) . . . . ?
W9 O36 W7 O28 -67.5(8) . . . . ?
W9 O36 W7 O21 -2(2) . . . . ?
W9 O36 W7 O19 6.7(7) . . . . ?
W8 O30 W7 O29 159(3) . . . . ?
W8 O30 W7 O36 -97(3) . . . . ?
W8 O30 W7 O28 7(4) . . . . ?
W8 O30 W7 O21 59(3) . . . . ?
W8 O30 W7 O19 -23(3) . . . . ?
W6 O28 W7 O29 175.8(8) . . . . ?
W6 O28 W7 O36 71.6(8) . . . . ?
W6 O28 W7 O30 -32.7(19) . . . . ?
W6 O28 W7 O21 -86.0(7) . . . . ?
W6 O28 W7 O19 -1.7(6) . . . . ?
W1 O21 W7 O29 152.4(12) . . . . ?
W1 O21 W7 O36 -15(2) . . . . ?
W1 O21 W7 O30 -108.4(12) . . . . ?
W1 O21 W7 O28 53.4(12) . . . . ?
W1 O21 W7 O19 -23.3(12) . . . . ?
Si1 O19 W7 O29 -166(7) . . . . ?
W9 O19 W7 O29 59(7) . . . . ?
W6 O19 W7 O29 -31(7) . . . . ?
Si1 O19 W7 O36 129.6(9) . . . . ?
W9 O19 W7 O36 -5.0(5) . . . . ?
W6 O19 W7 O36 -95.0(6) . . . . ?
Si1 O19 W7 O30 34.3(9) . . . . ?
W9 O19 W7 O30 -100.3(5) . . . . ?
W6 O19 W7 O30 169.7(5) . . . . ?
Si1 O19 W7 O28 -134.1(9) . . . . ?
W9 O19 W7 O28 91.3(5) . . . . ?
W6 O19 W7 O28 1.2(5) . . . . ?
Si1 O19 W7 O21 -54.1(8) . . . . ?
W9 O19 W7 O21 171.3(5) . . . . ?
W6 O19 W7 O21 81.3(5) . . . . ?
W10 O32 W8 O31 171.4(8) . . . . ?
W10 O32 W8 O23 70.0(8) . . . . ?
W10 O32 W8 O30 -87.4(8) . . . . ?
W10 O32 W8 O22 3.3(19) . . . . ?
W10 O32 W8 O20 -4.7(7) . . . . ?
W3 O23 W8 O31 -174.2(8) . . . . ?
W3 O23 W8 O32 -73.2(8) . . . . ?
W3 O23 W8 O30 29.7(19) . . . . ?
W3 O23 W8 O22 85.0(7) . . . . ?
```

```
W3 O23 W8 O20 0.2(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O31 -161(3) . . . . ?
W7 O30 W8 O32 97(3) . . . . ?
W7 O30 W8 O23 -5(4) . . . . ?
W7 O30 W8 O22 -60(3) . . . . ?
W7 O30 W8 O20 23(3) . . . . ?
W2 O22 W8 O31 -150.0(11) . . . . ?
W2 O22 W8 O32 18(2) . . . . ?
W2 O22 W8 O23 -50.6(11) . . . . ?
W2 O22 W8 O30 110.5(11) . . . . ?
W2 O22 W8 O20 25.8(11) . . . . ?
Si1 O20 W8 O31 -167(5) . . . . ?
W10 O20 W8 O31 -33(6) . . . . ?
W3 O20 W8 O31 58(6) . . . . ?
Si1 O20 W8 O32 -131.0(9) . . . . ?
W10 O20 W8 O32 3.6(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O32 94.6(6) . . . . ?
Si1 O20 W8 O23 134.3(9) . . . . ?
W10 O20 W8 O23 -91.1(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O23 -0.1(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O30 -34.5(8) . . . . ?
W10 O20 W8 O30 100.2(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O30 -168.9(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O22 52.2(8) . . . . ?
W10 O20 W8 O22 -173.1(5) . . . . ?
W3 O20 W8 O22 -82.2(5) . . . . ?
W5 O26 W9 O35 -138.0(12) . . . . ?
W5 O26 W9 O34 119.3(12) . . . . ?
W5 O26 W9 O27 -39.9(12) . . . . ?
W5 O26 W9 O36 35(2) . . . . ?
W5 O26 W9 O19 35.4(11) . . . . ?
W10 O34 W9 O35 -128.3(14) . . . . ?
W10 O34 W9 O26 -23.9(15) . . . . ?
W10 O34 W9 O27 71(2) . . . . ?
W10 O34 W9 O36 130.5(15) . . . . ?
W10 O34 W9 O19 59.9(14) . . . . ?
W6 O27 W9 O35 179.2(7) . . . . ?
W6 O27 W9 O26 75.6(7) . . . . ?
W6 O27 W9 O34 -20.1(17) . . . . ?
W6 O27 W9 O36 -79.6(7) . . . . ?
W6 O27 W9 O19 -8.5(6) . . . . ?
W7 O36 W9 O35 166.6(9) . . . . ?
W7 O36 W9 O26 -6.0(19) . . . . ?
W7 O36 W9 O34 -92.4(9) . . . . ?
W7 O36 W9 O27 69.6(8) . . . . ?
W7 O36 W9 O19 -6.8(7) . . . . ?
Si1 O19 W9 O35 -172(3) . . . . ?
W7 O19 W9 O35 -35(3) . . . . ?
W6 O19 W9 O35 55(3) . . . . ?
Si1 O19 W9 O26 48.2(8) . . . . ?
W7 O19 W9 O26 -175.1(5) . . . . ?
W6 O19 W9 O26 -84.7(5) . . . . ?
Si1 O19 W9 O34 -45.2(8) . . . . ?
W7 O19 W9 O34 91.5(5) . . . . ?
W6 O19 W9 O34 -178.1(4) . . . . ?
Si1 O19 W9 O27 139.0(8) . . . . ?
W7 O19 W9 O27 -84.3(5) . . . . ?
W6 O19 W9 O27 6.1(4) . . . . ?
Si1 O19 W9 O36 -132.2(9) . . . . ?
W7 O19 W9 O36 4.5(5) . . . . ?
W6 O19 W9 O36 94.9(5) . . . . ?
W4 O25 W10 O33 142.0(12) . . . . ?
W4 O25 W10 O34 -116.7(12) . . . . ?
W4 O25 W10 O24 42.5(12) . . . . ?
W4 O25 W10 O32 -27(2) . . . . ?
W4 O25 W10 O20 -32.1(11) . . . . ?
```

```
W9 O34 W10 O33 127.6(14) . . . . ?
W9 O34 W10 O25 23.1(15) . . . . ?
W9 O34 W10 O24 -73(2) . . . . ?
W9 O34 W10 O32 -131.9(15) . . . . ?
W9 O34 W10 O20 -59.2(14) . . . . ?
W3 O24 W10 O33 -178.2(7) . . . . ?
W3 O24 W10 O25 -74.8(7) . . . . ?
W3 O24 W10 O34 22.4(18) . . . . ?
W3 O24 W10 O32 81.8(7) . . . . ?
W3 O24 W10 O20 8.1(6) . . . . ?
W8 O32 W10 O33 -169.5(8) . . . . ?
W8 O32 W10 O25 -0.7(18) . . . . ?
W8 O32 W10 O34 91.0(8) . . . . ?
W8 O32 W10 O24 -71.1(8) . . . . ?
W8 O32 W10 O20 4.9(7) . . . . ?
Si1 O20 W10 O33 171(3) . . . . ?
W3 O20 W10 O33 -53(4) . . . . ?
W8 O20 W10 O33 36(4) . . . . ?
Si1 O20 W10 O25 -51.0(8) . . . . ?
W3 O20 W10 O25 84.9(5) . . . . ?
W8 O20 W10 O25 174.3(5) . . . . ?
Si1 O20 W10 O34 43.5(8) . . . . ?
W3 O20 W10 O34 179.4(5) . . . . ?
W8 O20 W10 O34 -91.2(5) . . . . ?
Si1 O20 W10 O24 -141.6(8) . . . . ?
W3 O20 W10 O24 -5.7(4) . . . . ?
W8 O20 W10 O24 83.7(5) . . . . ?
Si1 O20 W10 O32 131.4(9) . . . . ?
W3 O20 W10 O32 -92.7(5) . . . . ?
W8 O20 W10 O32 -3.3(5) . . . . ?
Mg1 O39 W11 O41 149.7(10) . . . . ?
Mg1 O39 W11 O42 51.1(10) . . . . ?
Mg1 O39 W11 O51 -109.3(10) . . . . ?
Mg1 O39 W11 O56 -40(3) . . . . ?
Mg1 O39 W11 O52 -21.9(9) . . . . ?
W12 O42 W11 O41 -171.6(6) . . . . ?
W12 O42 W11 O39 -69.4(7) . . . . ?
W12 O42 W11 O51 40.8(17) . . . . ?
W12 O42 W11 O56 96.2(6) . . . . ?
W12 O42 W11 O52 15.4(5) . . . . ?
W16 O51 W11 O41 -111.9(13) . . . . ?
W16 O51 W11 O39 146.2(13) . . . . ?
W16 O51 W11 O42 35(2) . . . . ?
W16 O51 W11 O56 -20.3(13) . . . . ?
W16 O51 W11 O52 59.7(13) . . . . ?
W17 O56 W11 O41 124.8(13) . . . . ?
W17 O56 W11 O39 -46(3) . . . . ?
W17 O56 W11 O42 -138.1(13) . . . . ?
W17 O56 W11 O51 24.6(12) . . . . ?
W17 O56 W11 O52 -64.1(12) . . . . ?
Si2 O52 W11 O41 103(3) . . . . ?
W12 O52 W11 O41 -49(3) . . . . ?
Si2 O52 W11 O39 -123.6(9) . . . . ?
W12 O52 W11 O39 84.9(5) . . . . ?
Si2 O52 W11 O42 139.7(10) . . . . ?
W12 O52 W11 O42 -11.8(4) . . . . ?
Si2 O52 W11 O51 -31.5(9) . . . . ?
W12 O52 W11 O51 177.0(5) . . . . ?
Si2 O52 W11 O56 52.0(9) . . . . ?
W12 O52 W11 O56 -99.5(5) . . . . ?
Mg1 O40 W12 O43 -150.7(10) . . . . ?
Mg1 O40 W12 O42 -51.9(11) . . . . ?
Mg1 O40 W12 O44 109.1(10) . . . . ?
Mg1 O40 W12 O57 42(3) . . . . ?
Mg1 O40 W12 O52 20.5(10) . . . . ?
W11 O42 W12 O43 172.1(6) . . . . ?
```

```
W11 O42 W12 O40 70.4(7) . . . . ?
W11 O42 W12 O44 -42.8(17) . . . . ?
W11 O42 W12 O57 -96.6(7) . . . . ?
W11 O42 W12 O52 -15.3(5) . . . . ?
W13 O44 W12 O43 113.7(13) . . . . ?
W13 O44 W12 O40 -144.9(13) . . . . ?
W13 O44 W12 O42 -31(2) . . . . ?
W13 O44 W12 O57 23.0(13) . . . . ?
W13 O44 W12 O52 -57.4(13) . . . . ?
W18 O57 W12 O43 -127.9(14) . . . . ?
W18 O57 W12 O40 40(3) . . . . ?
W18 O57 W12 O42 134.9(14) . . . . ?
W18 O57 W12 O44 -28.4(13) . . . . ?
W18 O57 W12 O52 61.5(13) . . . . ?
Si2 O52 W12 O43 -103(2) . . . . ?
W11 O52 W12 O43 49(3) . . . . ?
Si2 O52 W12 O40 122.6(9) . . . . ?
W11 O52 W12 O40 -85.2(5) . . . . ?
Si2 O52 W12 O42 -140.3(9) . . . . ?
W11 O52 W12 O42 11.8(4) . . . . ?
Si2 O52 W12 O44 30.3(9) . . . . ?
W11 O52 W12 O44 -177.6(5) . . . . ?
Si2 O52 W12 O57 -52.6(8) . . . . ?
W11 O52 W12 O57 99.6(5) . . . . ?
W18 O58 W13 O45 175.1(6) . . . . ?
W18 O58 W13 O44 73.9(7) . . . . ?
W18 O58 W13 O46 -14.5(15) . . . . ?
W18 O58 W13 O59 -84.1(7) . . . . ?
W18 O58 W13 O55 -9.1(5) . . . . ?
W12 O44 W13 O45 -149.0(13) . . . . ?
W12 O44 W13 O58 -46.3(13) . . . . ?
W12 O44 W13 O46 109.3(13) . . . . ?
W12 O44 W13 O59 27(2) . . . . ?
W12 O44 W13 O55 28.4(13) . . . . ?
W14 O46 W13 O45 134.1(11) . . . . ?
W14 O46 W13 O58 -36.4(18) . . . . ?
W14 O46 W13 O44 -124.3(11) . . . . ?
W14 O46 W13 O59 33.0(11) . . . . ?
W14 O46 W13 O55 -41.7(10) . . . . ?
W19 O59 W13 O45 176.2(8) . . . . ?
W19 O59 W13 O58 74.2(8) . . . . ?
W19 O59 W13 O44 0.1(19) . . . . ?
W19 O59 W13 O46 -83.0(8) . . . . ?
W19 O59 W13 O55 -1.2(6) . . . . ?
Si2 O55 W13 O45 -165(7) . . . . ?
W18 O55 W13 O45 64(7) . . . . ?
W19 O55 W13 O45 -31(7) . . . . ?
Si2 O55 W13 O58 137.6(9) . . . . ?
W18 O55 W13 O58 6.8(4) . . . . ?
W19 O55 W13 O58 -88.2(5) . . . . ?
Si2 O55 W13 O44 47.2(8) . . . . ?
W18 O55 W13 O44 -83.6(5) . . . . ?
W19 O55 W13 O44 -178.6(5) . . . . ?
Si2 O55 W13 O46 -44.7(8) . . . . ?
W18 O55 W13 O46 -175.4(5) . . . . ?
W19 O55 W13 O46 89.5(5) . . . . ?
Si2 O55 W13 O59 -133.3(9) . . . . ?
W18 O55 W13 O59 95.9(5) . . . . ?
W19 O55 W13 O59 0.9(5) . . . . ?
W19 O60 W14 O47 132.0(12) . . . . ?
W19 O60 W14 O46 29.5(12) . . . . ?
W19 O60 W14 O48 -130.6(12) . . . . ?
W19 O60 W14 O73 -39(3) . . . . ?
W19 O60 W14 O53 -56.7(12) . . . . ?
W13 O46 W14 O47 -114.6(11) . . . . ?
W13 O46 W14 O60 -13.1(11) . . . . ?
```

```
W13 O46 W14 O48 96.2(17) . . . . ?
W13 O46 W14 O73 151.1(11) . . . . ?
W13 O46 W14 O53 72.8(11) . . . . ?
W15 O48 W14 O47 -176.2(7) . . . . ?
W15 O48 W14 O60 82.1(7) . . . . ?
W15 O48 W14 O46 -26.5(18) . . . . ?
W15 O48 W14 O73 -81.1(7) . . . . ?
W15 O48 W14 O53 -2.2(5) . . . . ?
P2 O73 W14 O47 144.7(10) . . . . ?
P2 O73 W14 O60 -44(2) . . . . ?
P2 O73 W14 O46 -113.9(10) . . . . ?
P2 O73 W14 O48 49.0(10) . . . . ?
P2 O73 W14 O53 -26.1(9) . . . . ?
Si2 O53 W14 O47 -175(2) . . . . ?
W15 O53 W14 O47 35(3) . . . . ?
Si2 O53 W14 O60 55.2(8) . . . . ?
W15 O53 W14 O60 -95.2(5) . . . . ?
Si2 O53 W14 O46 -36.4(8) . . . . ?
W15 O53 W14 O46 173.2(5) . . . . ?
Si2 O53 W14 O48 152.1(9) . . . . ?
W15 O53 W14 O48 1.7(4) . . . . ?
Si2 O53 W14 O73 -119.8(9) . . . . ?
W15 O53 W14 O73 89.8(5) . . . . ?
W20 O61 W15 O49 -130.8(12) . . . . ?
W20 O61 W15 O50 -29.7(12) . . . . ?
W20 O61 W15 O48 131.9(11) . . . . ?
W20 O61 W15 O72 43(3) . . . . ?
W20 O61 W15 O53 57.9(11) . . . . ?
W16 O50 W15 O49 119.5(11) . . . . ?
W16 O50 W15 O61 16.2(11) . . . . ?
W16 O50 W15 O48 -94.0(17) . . . . ?
W16 O50 W15 O72 -147.9(11) . . . . ?
W16 O50 W15 O53 -69.6(10) . . . . ?
W14 O48 W15 O49 174.6(7) . . . . ?
W14 O48 W15 O61 -81.8(7) . . . . ?
W14 O48 W15 O50 27.6(19) . . . . ?
W14 O48 W15 O72 81.5(7) . . . . ?
W14 O48 W15 O53 2.2(6) . . . . ?
P2 O72 W15 O49 -145.8(10) . . . . ?
P2 O72 W15 O61 40(2) . . . . ?
P2 O72 W15 O50 113.8(10) . . . . ?
P2 O72 W15 O48 -50.4(10) . . . . ?
P2 O72 W15 O53 25.0(9) . . . . ?
Si2 O53 W15 O49 170(2) . . . . ?
W14 O53 W15 O49 -40(2) . . . . ?
Si2 O53 W15 O61 -54.5(8) . . . . ?
W14 O53 W15 O61 95.4(5) . . . . ?
Si2 O53 W15 O50 36.6(8) . . . . ?
W14 O53 W15 O50 -173.5(5) . . . . ?
Si2 O53 W15 O48 -151.6(9) . . . . ?
W14 O53 W15 O48 -1.7(4) . . . . ?
Si2 O53 W15 O72 121.3(8) . . . . ?
W14 O53 W15 O72 -88.8(5) . . . . ?
W11 O51 W16 O091 146.8(13) . . . . ?
W11 O51 W16 O63 44.3(13) . . . . ?
W11 O51 W16 O62 -31(2) . . . . ?
W11 O51 W16 O50 -112.2(13) . . . . ?
W11 O51 W16 O54 -31.7(12) . . . . ?
W17 O63 W16 O091 -175.2(7) . . . . ?
W17 O63 W16 O51 -74.2(7) . . . . ?
W17 O63 W16 O62 85.5(7) . . . . ?
W17 O63 W16 O50 13.8(17) . . . . ?
W17 O63 W16 O54 7.3(6) . . . . ?
W20 O62 W16 O091 -176.3(8) . . . . ?
W20 O62 W16 O51 1(2) . . . . ?
W20 O62 W16 O63 -74.1(8) . . . . ?
```

```
W20 O62 W16 O50 83.5(7) . . . . ?
W20 O62 W16 O54 2.2(6) . . . . ?
W15 O50 W16 O091 -138.0(11) . . . . ?
W15 O50 W16 O51 120.6(11) . . . . ?
W15 O50 W16 O63 33.0(19) . . . . ?
W15 O50 W16 O62 -38.6(11) . . . . ?
W15 O50 W16 O54 39.4(10) . . . . ?
Si2 O54 W16 O091 164(12) . . . . ?
W17 O54 W16 O091 -65(12) . . . . ?
W20 O54 W16 O091 28(13) . . . . ?
Si2 O54 W16 O51 -46.4(9) . . . . ?
W17 O54 W16 O51 85.1(5) . . . . ?
W20 O54 W16 O51 177.9(5) . . . . ?
Si2 O54 W16 O63 -136.9(9) . . . . ?
W17 O54 W16 O63 -5.4(4) . . . . ?
W20 O54 W16 O63 87.4(5) . . . . ?
Si2 O54 W16 O62 134.0(10) . . . . ?
W17 O54 W16 O62 -94.5(5) . . . . ?
W20 O54 W16 O62 -1.7(5) . . . . ?
Si2 O54 W16 O50 45.7(9) . . . . ?
W17 O54 W16 O50 177.3(5) . . . . ?
W20 O54 W16 O50 -90.0(5) . . . . ?
W11 O56 W17 O64 -148.8(12) . . . . ?
W11 O56 W17 O65 109.6(12) . . . . ?
W11 O56 W17 O63 -49.6(12) . . . . ?
W11 O56 W17 O71 19(2) . . . . ?
W11 O56 W17 O54 26.7(12) . . . . ?
W18 O65 W17 O64 -128.1(16) . . . . ?
W18 O65 W17 O56 -21.9(16) . . . . ?
W18 O65 W17 O63 71(2) . . . . ?
W18 O65 W17 O71 133.0(16) . . . . ?
W18 O65 W17 O54 61.1(16) . . . . ?
W16 O63 W17 O64 -178.6(7) . . . . ?
W16 O63 W17 O56 76.6(7) . . . . ?
W16 O63 W17 O65 -17.9(18) . . . . ?
W16 O63 W17 O71 -80.0(7) . . . . ?
W16 O63 W17 O54 -7.5(6) . . . . ?
W20 O71 W17 O64 168.8(8) . . . . ?
W20 O71 W17 O56 0.6(18) . . . . ?
W20 O71 W17 O65 -91.7(8) . . . . ?
W20 O71 W17 O63 70.0(8) . . . . ?
W20 O71 W17 O54 -7.3(7) . . . . ?
Si2 O54 W17 O64 -154(3) . . . . ?
W20 O54 W17 O64 -19(4) . . . . ?
W16 O54 W17 O64 70(3) . . . . ?
Si2 O54 W17 O56 52.9(8) . . . . ?
W20 O54 W17 O56 -171.7(6) . . . . ?
W16 O54 W17 O56 -83.4(5) . . . . ?
Si2 O54 W17 O65 -42.2(7) . . . . ?
W20 O54 W17 O65 93.2(5) . . . . ?
W16 O54 W17 O65 -178.5(5) . . . . ?
Si2 O54 W17 O63 141.5(8) . . . . ?
W20 O54 W17 O63 -83.1(5) . . . . ?
W16 O54 W17 O63 5.2(4) . . . . ?
Si2 O54 W17 O71 -130.4(8) . . . . ?
W20 O54 W17 O71 5.0(5) . . . . ?
W16 O54 W17 O71 93.3(5) . . . . ?
W12 O57 W18 O66 149.6(13) . . . . ?
W12 O57 W18 O65 -106.4(14) . . . . ?
W12 O57 W18 O58 52.3(13) . . . . ?
W12 O57 W18 O67 -13(2) . . . . ?
W12 O57 W18 O55 -22.8(13) . . . . ?
W17 O65 W18 O66 128.5(16) . . . . ?
W17 O65 W18 O57 21.5(17) . . . . ?
W17 O65 W18 O58 -76(2) . . . . ?
W17 O65 W18 O67 -133.7(16) . . . . ?
```

```
W17 O65 W18 O55 -62.4(16) . . . . ?
W13 O58 W18 O66 179.2(7) . . . . ?
W13 O58 W18 O57 -76.0(7) . . . . ?
W13 O58 W18 O65 23.2(16) . . . . ?
W13 O58 W18 O67 81.5(7) . . . . ?
W13 O58 W18 O55 9.3(5) . . . . ?
W19 O67 W18 O66 -168.2(8) . . . . ?
W19 O67 W18 O57 -5.2(19) . . . . ?
W19 O67 W18 O65 90.7(8) . . . . ?
W19 O67 W18 O58 -71.2(8) . . . . ?
W19 O67 W18 O55 5.2(7) . . . . ?
Si2 O55 W18 O66 164(3) . . . . ?
W19 O55 W18 O66 29(3) . . . . ?
W13 O55 W18 O66 -62(3) . . . . ?
Si2 O55 W18 O57 -53.0(8) . . . . ?
W19 O55 W18 O57 172.0(6) . . . . ?
W13 O55 W18 O57 81.3(5) . . . . ?
Si2 O55 W18 O65 44.2(7) . . . . ?
W19 O55 W18 O65 -90.8(5) . . . . ?
W13 O55 W18 O65 178.5(4) . . . . ?
Si2 O55 W18 O58 -140.9(8) . . . . ?
W19 O55 W18 O58 84.1(5) . . . . ?
W13 O55 W18 O58 -6.6(4) . . . . ?
Si2 O55 W18 O67 131.3(8) . . . . ?
W19 O55 W18 O67 -3.7(5) . . . . ?
W13 O55 W18 O67 -94.4(5) . . . . ?
W18 O67 W19 O68 170.3(7) . . . . ?
W18 O67 W19 O59 70.3(8) . . . . ?
W18 O67 W19 O69 -88.2(8) . . . . ?
W18 O67 W19 O60 8(2) . . . . ?
W18 O67 W19 O55 -5.1(6) . . . . ?
W13 O59 W19 O68 -175.1(8) . . . . ?
W13 O59 W19 O67 -72.3(8) . . . . ?
W13 O59 W19 O69 41.5(18) . . . . ?
W13 O59 W19 O60 87.1(7) . . . . ?
W13 O59 W19 O55 1.2(6) . . . . ?
W20 O69 W19 O68 -175(3) . . . . ?
W20 O69 W19 O67 81(3) . . . . ?
W20 O69 W19 O59 -32(4) . . . . ?
W20 O69 W19 O60 -76(3) . . . . ?
W20 O69 W19 O55 7(3) . . . . ?
W14 O60 W19 O68 -156.2(12) . . . . ?
W14 O60 W19 O67 6(2) . . . . ?
W14 O60 W19 O59 -58.6(12) . . . . ?
W14 O60 W19 O69 104.9(12) . . . . ?
W14 O60 W19 O55 18.9(12) . . . . ?
Si2 O55 W19 O68 176(45) . . . . ?
W18 O55 W19 O68 -51(6) . . . . ?
W13 O55 W19 O68 40(6) . . . . ?
Si2 O55 W19 O67 -129.3(9) . . . . ?
W18 O55 W19 O67 4.0(5) . . . . ?
W13 O55 W19 O67 95.0(5) . . . . ?
Si2 O55 W19 O59 134.9(9) . . . . ?
W18 O55 W19 O59 -91.8(5) . . . . ?
W13 O55 W19 O59 -0.9(5) . . . . ?
Si2 O55 W19 O69 -30.2(8) . . . . ?
W18 O55 W19 O69 103.1(5) . . . . ?
W13 O55 W19 O69 -166.0(5) . . . . ?
Si2 O55 W19 O60 55.8(8) . . . . ?
W18 O55 W19 O60 -171.0(5) . . . . ?
W13 O55 W19 O60 -80.0(5) . . . . ?
W17 O71 W20 O70 -170.4(8) . . . . ?
W17 O71 W20 O69 89.1(7) . . . . ?
W17 O71 W20 O62 -69.2(8) . . . . ?
W17 O71 W20 O61 -2.2(19) . . . . ?
W17 O71 W20 O54 7.1(6) . . . . ?
```

```
W19 O69 W20 O70 176(3) . . . . ?
W19 O69 W20 O71 -81(3) . . . . ?
W19 O69 W20 O62 28(4) . . . . ?
W19 O69 W20 O61 76(3) . . . . ?
W19 O69 W20 O54 -6(3) . . . . ?
W16 O62 W20 O70 174.7(8) . . . . ?
W16 O62 W20 O71 72.5(8) . . . . ?
W16 O62 W20 O69 -37.9(18) . . . . ?
W16 O62 W20 O61 -86.0(7) . . . . ?
W16 O62 W20 O54 -2.3(6) . . . . ?
W15 O61 W20 O70 156.1(12) . . . . ?
W15 O61 W20 O71 -12(2) . . . . ?
W15 O61 W20 O69 -105.4(12) . . . . ?
W15 O61 W20 O62 57.5(11) . . . . ?
W15 O61 W20 O54 -21.2(11) . . . . ?
Si2 O54 W20 O70 170(8) . . . . ?
W17 O54 W20 O70 37(9) . . . . ?
W16 O54 W20 O70 -52(9) . . . . ?
Si2 O54 W20 O71 127.6(10) . . . . ?
W17 O54 W20 O71 -5.6(5) . . . . ?
W16 O54 W20 O71 -94.5(5) . . . . ?
Si2 O54 W20 O69 30.3(9) . . . . ?
W17 O54 W20 O69 -102.8(5) . . . . ?
W16 O54 W20 O69 168.3(5) . . . . ?
Si2 O54 W20 O62 -136.3(9) . . . . ?
W17 O54 W20 O62 90.5(5) . . . . ?
W16 O54 W20 O62 1.6(5) . . . . ?
Si2 O54 W20 O61 -56.0(9) . . . . ?
W17 O54 W20 O61 170.8(5) . . . . ?
W16 O54 W20 O61 81.9(5) . . . . ?
P2 O74 Mg1 O13 35(5) . . . . ?
P2 O74 Mg1 O39 125(5) . . . . ?
P2 O74 Mg1 O40 -144(5) . . . . ?
P2 O74 Mg1 O9 -57(5) . . . . ?
P2 O74 Mg1 O38 4(8) . . . . ?
W5 O13 Mg1 O74 -94.2(11) . . . . ?
W5 O13 Mg1 O39 162.6(11) . . . . ?
W5 O13 Mg1 O40 80(3) . . . . ?
W5 O13 Mg1 O9 -3.7(11) . . . . ?
W5 O13 Mg1 O38 80.5(11) . . . . ?
W11 O39 Mg1 O74 71.0(11) . . . . ?
W11 O39 Mg1 O13 161.4(10) . . . . ?
W11 O39 Mg1 O40 -30.8(10) . . . . ?
W11 O39 Mg1 O9 -103(2) . . . . ?
W11 O39 Mg1 O38 -117.7(10) . . . . ?
W12 O40 Mg1 O74 -72.1(11) . . . . ?
W12 O40 Mg1 O13 114(3) . . . . ?
W12 O40 Mg1 O39 31.1(10) . . . . ?
W12 O40 Mg1 O9 -162.0(10) . . . . ?
W12 O40 Mg1 O38 113.3(10) . . . . ?
W4 O9 Mg1 O74 89.0(11) . . . . ?
W4 O9 Mg1 O13 -1.4(11) . . . . ?
W4 O9 Mg1 O39 -97(3) . . . . ?
W4 O9 Mg1 O40 -169.2(10) . . . . ?
W4 O9 Mg1 O38 -82.2(10) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.993
_diffrn_reflns_theta_full              24.39
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.993
_refine_diff_density_max    1.466
_refine_diff_density_min   -1.955
_refine_diff_density_rms    0.226
```